

УДК 530.145.

КВАНТОВЫЕ ЯМЫ В ГРАФЕНЕ С МАССОВОЙ ЩЕЛЬЮ

© 2026 г. Г. А. Красюков^{a, b, *}, О. В. Павловский^{a, b, **}^aНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123182 Россия^bМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия

*E-mail: krasiukov.ga18@physics.msu.ru

**E-mail: pavlovsky@physics.msu.ru

Поступила в редакцию 18.06.2025 г.

После доработки 29.06.2025 г.

Принята к публикации 10.07.2025 г.

В работе рассматривается модель квантовой ямы, построенной на основе графена на подложке, генерирующей массовую щель. Анализируется ситуация, когда в структуре подложки есть дефект, а структура графена остается идеальной. Такой дефект обеспечивает пространственную неоднородность массовой щели. В работе показано, что неоднородность массовой щели приводит к появлению квантовой ямы как для электронных, так и для дырочных возбуждений. На основе модели двумерного поля Дирака были исследованы локализованные электронные и дырочные состояния, получены их волновые функции и энергетический спектр. Исследованы различные квантовые ямы, полученные на основе неоднородностей разного размера и формы. Показана нетривиальная зависимость энергетического спектра локализованных состояний от параметров ямы.

Ключевые слова: графен, массовая щель, поле Дирака

DOI: 10.56304/S2079562925060132

1. ВВЕДЕНИЕ

Конфайнмент электронных состояний в графене рассматривается достаточно давно, как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения [1, 2]. Обсуждались различные способы захвата электронного состояния, например с помощью магнитных ловушек [3]. В недавней работе [4] был исследован конфайнмент электронных состояний с помощью магнитных ловушек в случае графена на подложке, генерирующей массовую щель. В нашей работе мы обсудим способ создания ловушки для электронных состояний графена, основанной на пространственной неоднородности генерируемой ей массовой щели.

Изучение графена на подложке, генерирующей массовую щель (гэппированный графен), является одним из важнейших направлений в современной индустрии наноматериалов. Действительно, возможность контролировать проводящие свойства материалов — одна из ключевых задач, стоящих перед современной нанoeлектроникой [5, 6]. Главной особенностью графена является высокая подвижность электронных возбуждений. Эта величина характеризует силу отклика зарядов на приложенное электрическое поле. Оказывается, что при комнатных температурах подвижность в графене составляет $\sim 2 \cdot 10^4$ см²/(В · с) [7, 8], что на порядок больше, чем в кремниевых транзисторах.

В подвешенном состоянии (то есть отделенный от подложки) графен представляет собой полуметалл с нулевой шириной запрещенной зоны и линейным законом дисперсии носителей заряда: $E = \pm \hbar v_f |k|$, где $\hbar$ — постоянная Планка, а $|k| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ — модуль волнового вектора в двумерном пространстве, отсчитанного от точек Дирака K или K' , v_f — скорость Ферми. Такой вид спектра обеспечивается симметрией двух треугольных подрешеток графена. Однако при наличии подложки определенного гексагонального типа симметрия подрешеток может нарушаться, при этом в энергетическом спектре графена вместо точек Дирака образуется щель, а сам графен обладает свойствами полупроводника. В контексте создания графеновых структур с массовой щелью крайне важна технология эпитаксиального роста на подложке из гексагонального карбида кремния (h-SiC) [9], поскольку она позволяет получать недорогие образцы графена в промышленных масштабах. В результате развития современных технологий происходит улучшение как качества образцов графена, так и подложек, и если первые исследования сообщали о величине массовой щели порядка 0.26 эВ [10], то в недавних работах утверждается, что этот показатель составляет уже порядка 0.6 эВ [11]. Также сообщается о возможности создания графена с массовой ще-

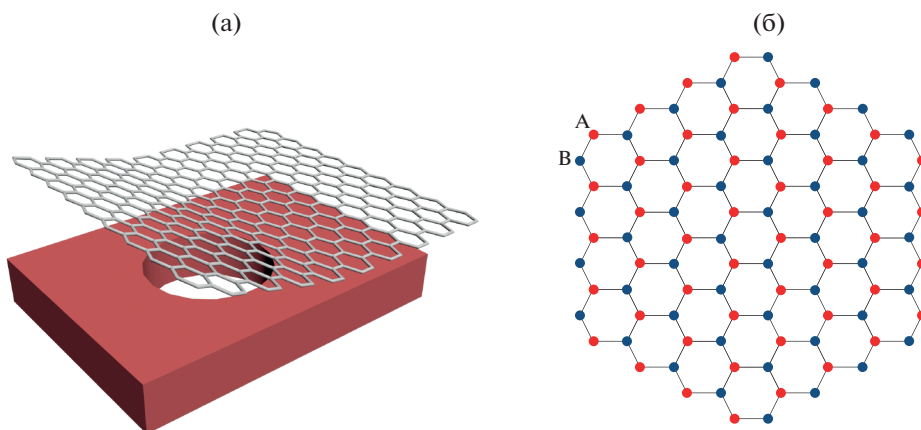


Рис. 1. (а) Слой графена на подложке с дефектом. (б) Гексагональная решетка графена, состоящая из двух подрешеток: А (красные узлы) и В (синие).

лю на подложке из гексагонального нитрида бора h-BN [12] с величиной гэпа 53 мэВ.

Целью данной работы является исследование возможности построить квантовую яму на основе геттированного графена. Массовая щель 2Δ связана с величиной кирального потенциала G , который входит в уравнение Дирака. Если подложка без дефектов идеально прилегает к листу графена, то киральный потенциал является константой $G = \Delta = \text{const}$. Изначальной идеей реализации квантовой ямы было создание в подложке дефекта с помощью ионного пучка или фотонной литографии (рис. 1а), т.е. создание нетривиальной зависимости в потенциале $G(r)$ (r — радиус дефекта). В таком случае все дефекты структуры находятся только на подложке, а кристаллическая структура графена остается идеальной. В связи с этим в месте дыры на подложке подрешеточная симметрия восстанавливается и в этой области у носителя заряда нет массы. Вдали от дефекта можно наблюдать нарушение симметрии подрешетки, что приводит к возникновению массовой щели.

Также в работе мы рассмотрим и другие формы и типы дефектов подложки. Например, будет рассмотрен случай структурного дефекта подложки гексагонального карбида кремния, в котором атомы кремния и углерода локально поменяются местами, при этом атомы листа графена останутся на своих местах. Это аналогично тому случаю, как если бы атомы подрешеток А и В графена (рис. 1б) поменялись местами или как если бы потенциал G (или эффективная масса возбуждения m) поменяли свой знак.

Взаимное расположение атомов графена и подложки играет в данной задаче очень важную роль, так как благодаря этому можно увеличить энергию электрона атома подрешетки А по сравнению с атомом подрешетки В, что обеспечивает

положительную массу электронного возбуждения графена. Напротив, иное расположение увеличивает энергию электрона подрешетки В относительно атома подрешетки А и создает, соответственно, отрицательную массу. Таким образом, у кирального потенциала G может быть три состояния: $+G_0$ (положительная киральность), 0 (нулевая киральность, или область негеттированного графена) и $-G_0$ (отрицательная киральность). Между этими состояниями потенциала могут происходить переходы. По сути, в работе перебирались комбинации этих состояний и исследовалось поведение системы при различных параметрах, характеризующих переходы.

Для аппроксимации таких пространственных переходов между киральностями в работе используются ступенчатые функции, такие как гиперболический тангенс. Например, функция

$$G(r) = \frac{G_0}{2}(1 + \tanh(a(r - r_l)))$$

описывает пространственный переход из нулевой киральности в положительную при $r = r_l$ в соответствии с изначальной идеей, изложенной выше и схематически представленной на рис. 1а. Параметр a характеризует степень размытия при переходе. Используемое в численных расчетах значение было достаточно большим ($a = 75$), так что переход происходил резко, с очень узкой областью размытия. В работе [13] показано, что для достаточно больших a поведение решений слабо зависит от точного значения этого параметра (например, для $a = 5$ и 75 зависимости получаются очень близкие). Но даже столь большое численное значение a позволяет сказать, что ширина переходной зоны составляет порядка шести межатомных расстояний в графене (0.142 нм), поэтому рассмотрение непрерывной задачи, описываемой уравнением Дирака, возможно.

2. КИРАЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ С ОДНИМ ПЕРЕХОДОМ

Рассмотрим электронное возбуждение в графене с неоднородной массовой щелью в сферически симметричном случае с киральным потенциалом $G(r)$, зависящим только от расстояния до центра неоднородности. В таком случае электронное возбуждение может быть описано с помощью 2 + 1-мерного уравнения Дирака:

$$(-i\hbar v_f(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + G(r)\sigma_z)\psi(r) = E\psi(r), \quad (1)$$

где $\sigma_{x,y,z}$ — матрицы Паули

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

В случае сферически симметричной задачи будем использовать подстановку

$$\psi_j(r, \phi) = \begin{pmatrix} e^{i(j-\frac{1}{2})\phi} A(r) \\ ie^{i(j+\frac{1}{2})\phi} B(r) \end{pmatrix},$$

где j — полный угловой момент.

Тогда из уравнения Дирака (1) получаем систему:

$$\begin{bmatrix} (E - G(r)) & -\hbar v_f \left(\partial_r + \frac{j + \frac{1}{2}}{r} \right) \\ \hbar v_f \left(\partial_r - \frac{j - \frac{1}{2}}{r} \right) & (E + G(r)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A(r) \\ B(r) \end{bmatrix} = 0.$$

Пусть вдали от неоднородности величина кирального потенциала равна G_0 . Переходя к безразмерным величинам $\left(r \rightarrow \frac{\hbar v_f}{G_0} r; E \rightarrow G_0 E \right)$ и рассматривая состояние $j = \frac{1}{2}$, получаем:

$$\begin{cases} \left(E - \frac{G(r)}{G_0} \right) A(r) - \left(B'(r) + \frac{B(r)}{r} \right) = 0, \\ A'(r) + \left(E + \frac{G(r)}{G_0} \right) B(r) = 0. \end{cases} \quad (2)$$

С помощью метода стрельбы можно получить спектр квантовой задачи с уравнением (2). Спектр уровней энергии в этой задаче охватывает как положительную область от 0 до 1, так и отрицательную от -1 до 0. С физической точки зрения возбуждения положительной энергии связаны с электронными возбуждениями, а отрицательной энергии — с возбуждением дырок. Рассматривались киральные потенциалы различных видов (рис. 2).

Случай $G(0) = 0$ описывает ситуацию, когда неоднородность связана с обширной вакансией в

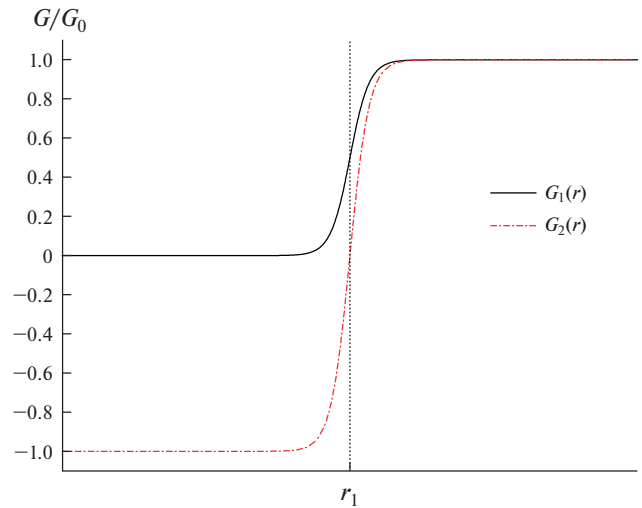


Рис. 2. Используемые виды потенциальных ям $G(r)$ с одним переходом.

структуре подложки. Такая яма на поверхности подложки может быть реализована различными нанотехнологическими способами, о чем мы упоминали во введении. Случай $G(0) = -G_0$ связан со структурным дефектом на поверхности подложки, вызванным локальным нарушением подрешеточной симметрии.

Рассмотрим сначала случай ямы, которая описывается с помощью кирального потенциала вида $G_1(r) = \frac{G_0}{2} (1 + \tanh(a(r - r_1)))$ (на рис. 2 — черная сплошная линия). Такой потенциал подразумевает переход из области $G = 0$ в область $G = G_0$ с увеличением радиуса.

Энергетический спектр задачи представлен на рис. 3а. На нем показано поведение энергии основного состояния электронов, которое обозначено за u_0 , а также первого и второго возбужденного состояния для электронных состояний в киральном потенциале $G(r)$. Аналогичная картина поведения представлена также и для дырок. Заметим, что электронное состояние существует для любых радиусов дефекта, однако оно отличается от величины массовой щели при радиусе дефекта $r_1 > 0.8$. Асимметричность спектра может быть объяснена видом системы (2) — уравнения неинвариантны относительно замены $E \rightarrow -E$. Однако система становится инвариантной относительно отражения энергии $E \rightarrow -E$ при одновременном отражении потенциала $G(r) \rightarrow -G(r)$ (и одной из компонент волновой функции $A(r) \rightarrow -A(r)$). Это замечание будет справедливо для киральных потенциалов любого вида. То есть, исходя из знания спектра для задачи с потенциалом $G(r)$, мы сразу можем сделать вывод о виде спектра для задачи с

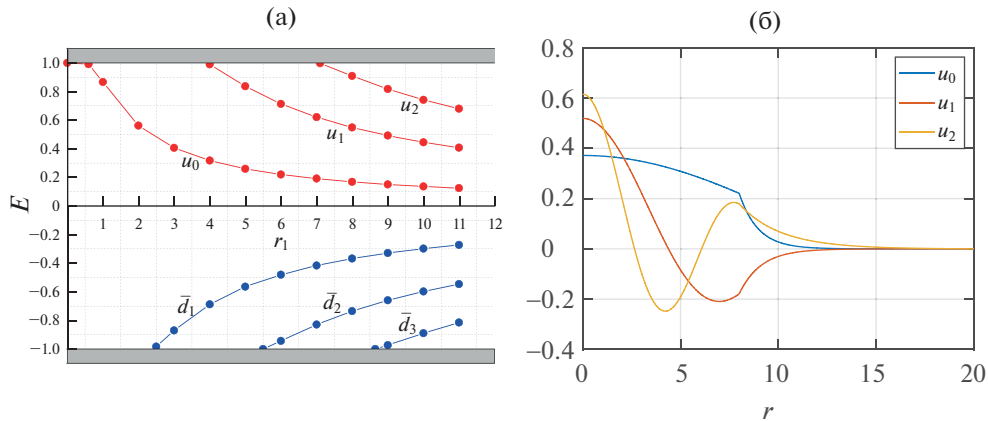


Рис. 3. (а) Спектр $E(r_1)$ задачи с потенциалом $G_1(r)$. (б) Волновые функции $A(r)$ трех состояний электрона в потенциале $G_1(r)$ для радиуса дефекта $r_1 = 8$.

потенциалом $-G(r)$ — он получится отражением относительно оси $E = 0$.

На рис. 3б–4б представлены результаты анализа волновых функций для различных значений энергии. Сразу скажем, что мы можем без потери смысла ограничиться представлением на рисунках лишь верхней компоненты $A(r)$ двухкомпонентного спинора, поскольку функции $A(r)$ и $B(r)$ локализованы примерно в одной области. На рис. 3б показаны электронные волновые функции $A(r)$. Видно, что главное квантовое число связано с числом пересечения функции $A(r)$ с нулем так же, как и в одномерных квантовомеханических системах. На рис. 4а представлены результаты анализа функции $A(r)$ для дырок. Отличительным свойством задачи для электронов и для дырок является то, что основное состояние электрона в дефекте всегда существует, а для дырки основное состояние появляется при радиусе дефекта $r_1 > 2.5$ (что соответствует примерно 6 нм для карбида кремния), при этом дырочного состояния d_0 вообще нет — основное состояние для дырки d_1 начинается с одного пересечения волновой функции с осью абсцисс.

В дальнейшем исследовании рассматривался также киральный потенциал

$$G_2(r) = G_0 \tanh(a(r - r_1))$$

(красный штрихпунктир на рис. 2), обеспечивающий переход из отрицательной киральности в положительную. Такой потенциал отвечает случаю структурного дефекта на подложке, а не ямы (вакансии), как в исследовании выше. В таком случае зависимость энергетического спектра значительно отличается от случая G_1 , есть только одно основное состояние электронного возбуждения, а дырочных состояний нет ни при каких радиусах дефектов. Спектр представлен на рис. 5а.

Важно отметить, что зависимость энергии возбуждения от радиуса в рассматриваемых случаях также различается. Характер убывания зависимости $E(r_1)$ показан на рис. 5а. Оказывается, что зависимость энергии основного состояния в случае смены киральности пропорционален кривизне для больших радиусов неоднородности, то есть $E(\kappa) \sim \kappa$, где $\kappa = \frac{1}{r_1}$ — кривизна дефекта (рис. 5б).

3. КИРАЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ С ДВУМЯ ПЕРЕХОДАМИ

В данном разделе рассмотрим более сложную ситуацию, когда влияние неоднородности геттирующей подложки приводит к нескольким переменам киральности, происходящим при разных радиусах. Предположим, что переход от киральности $G(r) = -G_0$ к $G(r) = G_0$ происходит через промежуточную область с $G(r) = 0$. Модельный киральный потенциал, описывающий данную ситуацию, имеет вид

$$G_3(r) = \frac{G_0}{2} (\tanh(a(r - r_1)) + \tanh(a(r - r_2)))$$

(черная сплошная линия на рис. 6). Здесь и далее в задачах такого плана фиксировалась величина $r_1 + r_2$ и изучалось поведение системы в зависимости от $\Delta r = r_2 - r_1$, т.е. центр промежуточной области был закреплен, а ее границы одновременно расплывались в противоположные стороны. Очевидно, в пределе $\Delta r \rightarrow 0$ имеем ту же ситуацию, что и с потенциалом $G_2(r)$ (рис. 7а).

При увеличении Δr появляются новые локализованные состояния, как электронные, так и дырочные. Можно заметить, что в геттированных областях решение быстро убывает при удалении от границы перехода, а в области $G = 0$ име-

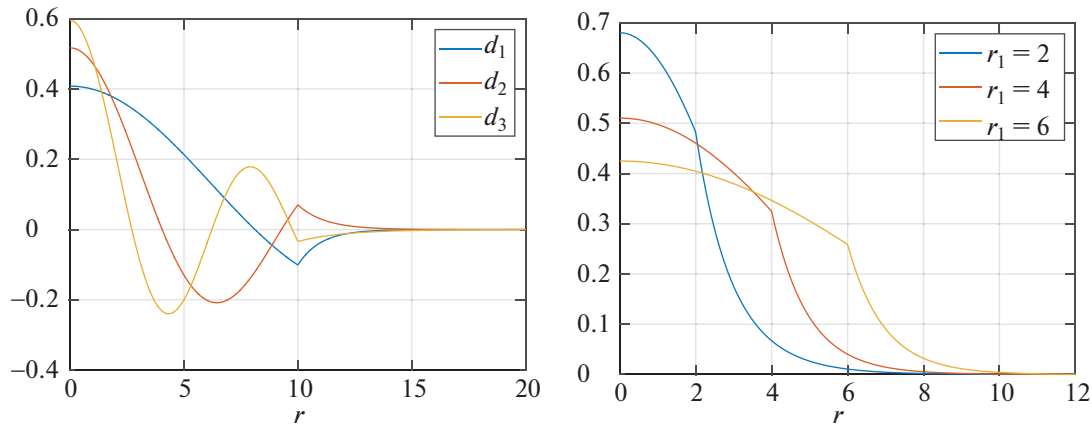


Рис. 4. (а) Волновые функции $A(r)$ трех состояний дырки в потенциале $G_1(r)$ для радиуса дефекта $r_1 = 10$. (б) Волновые функции $A(r)$ основного состояния электрона для радиусов дефекта $r_1 = 2$, $r_1 = 4$ и $r_1 = 6$.

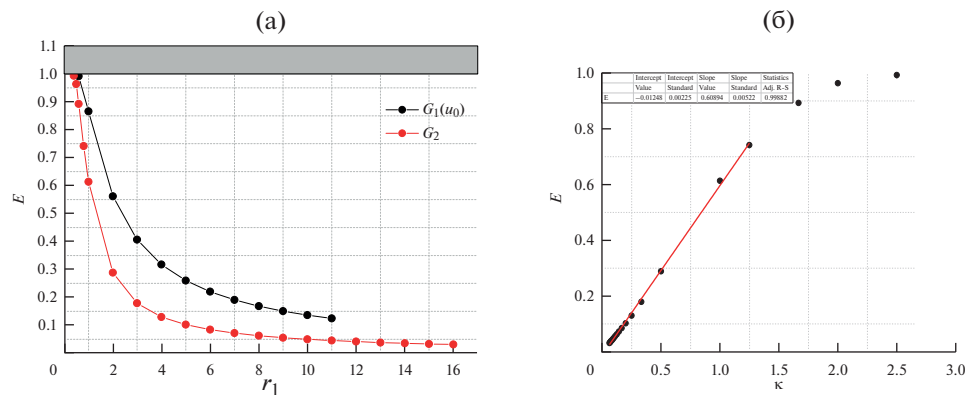


Рис. 5. (а) Спектр $E(r_1)$ задачи с потенциалом $G_2(r)$ (красный). Для сравнения на рисунке также представлен график (черный) зависимости энергии основного состояния электронов от радиуса дефекта в задаче с потенциалом $G_1(r)$. (б) График зависимости энергии состояния E от кривизны дефекта в задаче с потенциалом G_2 .

ем набор волновых решений (рис. 7б, 7в). Спектр задачи представлен на рис. 8а. Основное электронное состояние слабо меняется при увеличении Δr , оставаясь в пределах между 0.06 и 0.08 (напомним, энергия отнормирована на величину гэпа $E \rightarrow G_0 E$). Энергия остальных состояний убывает по модулю с раздвижением границ промежуточной нулевой области. В целом спектр близок к симметричному виду, однако при более детальном рассмотрении можно заметить, что электронные состояния по модулю энергии лежат выше, чем дырочные. Далее рассмотрим потенциал вида

$$G_4(r) = G_0(\tanh(a(r - r_1)) - \tanh(a(r - r_2)) - 1)$$

(синий пунктир на рис. 6). Такой гэп обеспечивает переход из $-G_0$ в G_0 при $r = r_1$ и обратно при $r = r_2$. В этом случае есть по одному уровню элек-

тронных и дырочных состояний (рис. 8б). При $\Delta r \rightarrow 0$ имеем ситуацию обычного геттированного графена. При увеличении Δr энергии электронных и дырочных состояний убывают, подходя довольно близко к нулю (минимальное значение разницы между электронным и дырочным состоянием равно 0.14). При промежуточных значениях Δr имеем ситуацию двугорбой волновой функции (рис. 9б, 10б), когда она локализована на обоих переходах киральности $G(r)$. При малых Δr можем заметить симметрию между компонентами спинора: электронные $A(r)$ по форме схожи с дырочными $B(r)$, и наоборот – электронные $B(r)$ схожи с дырочными $A(r)$. В системе (2) при больших r (r_1, r_2) можно пренебречь слагаемым $B(r)/r$, тогда замены $E \rightarrow -E$ и $A(r) \leftrightarrow B(r)$ оставляют уравнения инвариантными. Однако получаемые

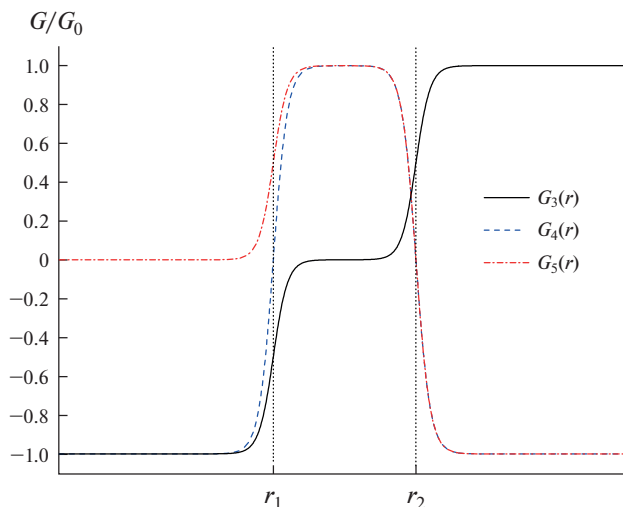


Рис. 6. Используемые виды потенциальных ям $G(r)$ с двумя переходами.

двугорбые решения несимметричны относительно центра промежуточной области $(r_1+r_2)/2$. Электронные решения больше локализируются на переходе из $-G_0$ в G_0 , а дырочные решения — на переходе из G_0 в $-G_0$. При больших Δr это приводит к тому, что решения “не видят” второго перехода в киральном потенциале и имеют только один пик. В этом пределе задача становится аналогичной задаче с потенциалом с единственным переходом $G_2(r)$ (рис. 11). Тогда спектр дырочных состояний с точностью до знака определяется рис. 5б с установленной зависимостью $E \sim \kappa$, а спектр электронных состояний определяется рис. 5б, где экранирование приводит к повышению энергии.

Наконец, предметом исследования стала задача с потенциалом

$$G_5(r) = G_0 \left(\frac{1}{2} \tanh(a(r - r_1)) - \tanh(a(r - r_2)) - \frac{1}{2} \right)$$

(красный штрихпунктир на рис. 6) с переходами из 0 в G_0 и из G_0 в $-G_0$. В отличие от предыдущей, эта задача богата на различные энергетические уровни (рис. 12). При малых Δr электронная волновая функция характеризуется резким переходом в промежуточной области через ноль (рис. 13а). При увеличении Δr высота пика, отвечающего переходу в точке $r = r_2$, уменьшается, волновая функция сглаживается, и, начиная с некоторой величины Δr , волновая функция перестает “видеть” второй переход в киральном потенциале и сразу стремится к нулю без изменения в знаке в промежуточной области (рис. 13б). Поскольку при этом решение локализуется на первом переходе (при $r = r_1$), значения энергии уве-

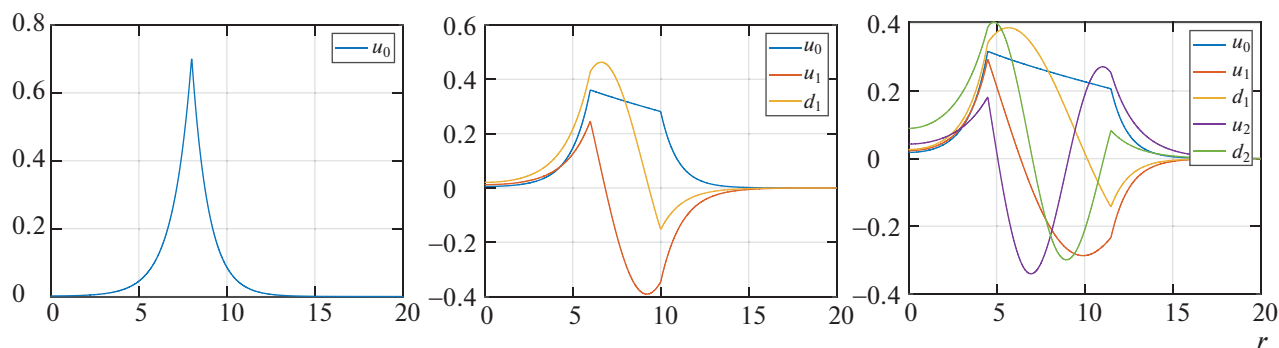


Рис. 7. Волновые функции $A(r)$ в потенциале $G_3(r)$ для трех различных значений размера промежуточной области $\Delta r = r_2 - r_1$: (а) $\Delta r = 0$; (б) $\Delta r = 4$; (в) $\Delta r = 7$.

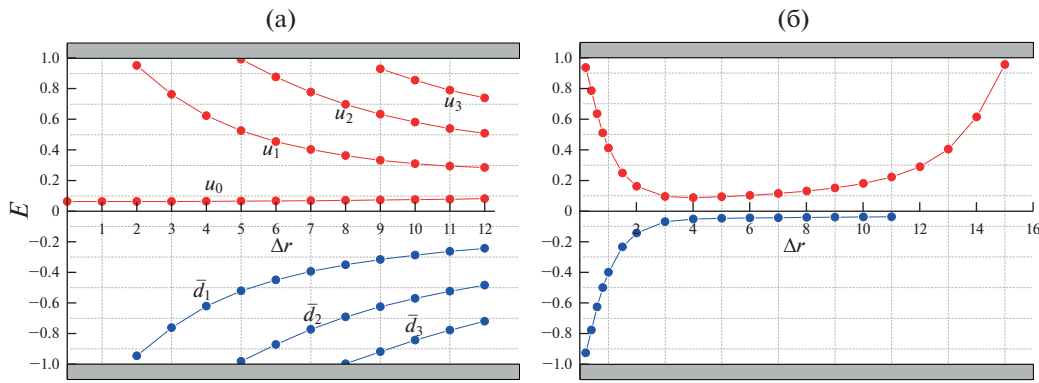


Рис. 8. (а) Спектр $E(r)$ задачи с потенциалом $G_3(r)$. (б) Спектр $E(r)$ задачи с потенциалом $G_4(r)$.

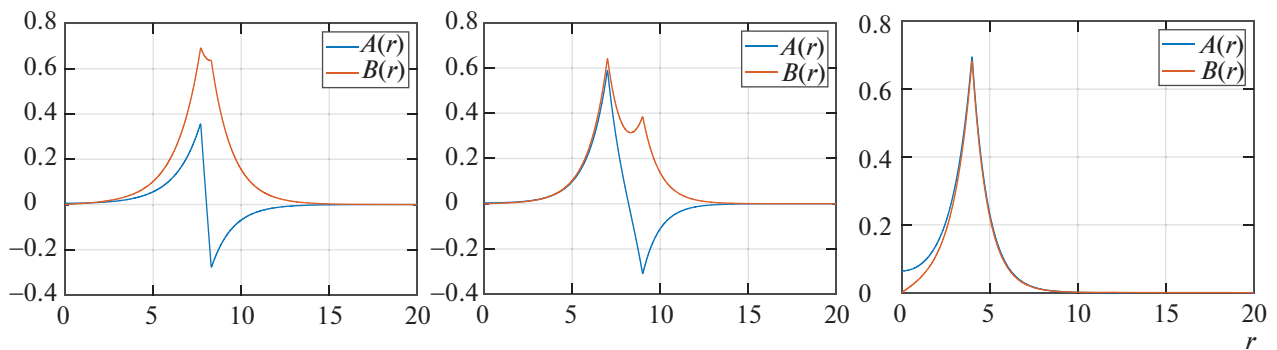


Рис. 9. Электронные волновые функции $A(r)$ и $B(r)$ в потенциале $G_4(r)$ для трех различных значений размера промежуточной области $\Delta r = r_2 - r_1$: (а) $\Delta r = 0.6$; (б) $\Delta r = 2$; (в) $\Delta r = 8$.

личиваются, как при уменьшении r_1 в задаче с потенциалом $G_1(r)$ (рис. 3а). При отрицательных энергиях и небольших Δr обнаруживается на один энергетический уровень больше. Интересно поведение волновой функции основного состояния — так же, как и в случае электронных возбуж-

дений, при малых Δr профиль волновой функции претерпевает резкое изменение, однако это не переход через ноль, а пик (рис. 14а). При увеличении Δr пик становится все выше и выше, так что до второго перехода (при $r = r_2$) в киральном потенциале изменение волновой функции является

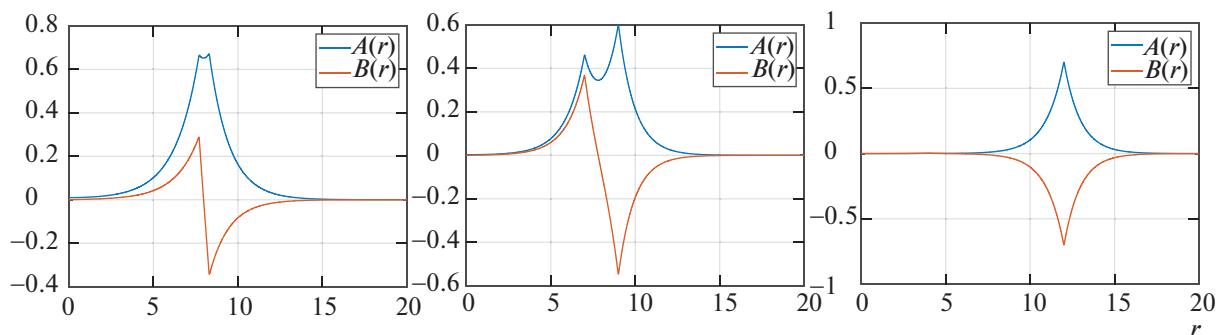


Рис. 10. Дырочные волновые функции $A(r)$ и $B(r)$ в потенциале $G_4(r)$ для трех различных значений размера промежуточной области $\Delta r = r_2 - r_1$: (а) $\Delta r = 0.6$; (б) $\Delta r = 2$; (в) $\Delta r = 8$.

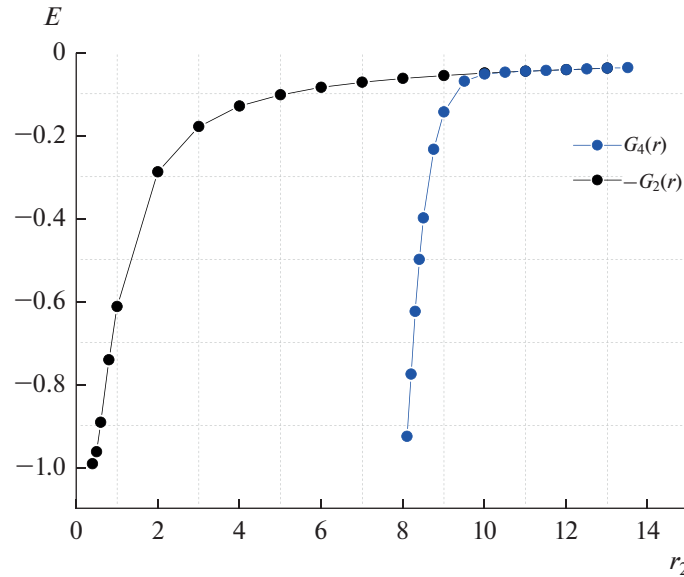


Рис. 11. Сравнение зависимости дырочного спектра в задаче с потенциалом $G_4(r)$ от радиуса второго перехода (синий) r_2 со спектром в задаче $-G_2(r)$ (черный). При $r_2 > 10$ ($\Delta r > 4$) спектры совпадают.

незначительным (рис. 14б) и решение становится подобным решению в задаче с $G(r) = -G_2(r)$ с переходом из G_0 в $-G_0$. Однако особенность задачи в том, что она не становится аналогичной полностью, поскольку для второго дырочного состояния такое упрощение не работает и решение локализуется в области до и вблизи первого перехода при $r = r_1$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе была рассмотрена возможность создания локализованных электронных состояний

на основе неоднородностей подложки графена, которая генерирует массовую щель. Были изучены пять задач с различными типами пространственных переходов между киральностями. Было показано, что локальные пространственные неоднородности массовой щели в графене могут стать квантовыми ямами как для электронных, так и для дырочных состояний внутри массовой щели. Конкретный спектр состояний зависит от вида пространственных переходов.

Одним из основных результатов стало установление любопытной зависимости энергии электронных состояний от кривизны дефекта для задачи с переходом из отрицательной киральности в поло-

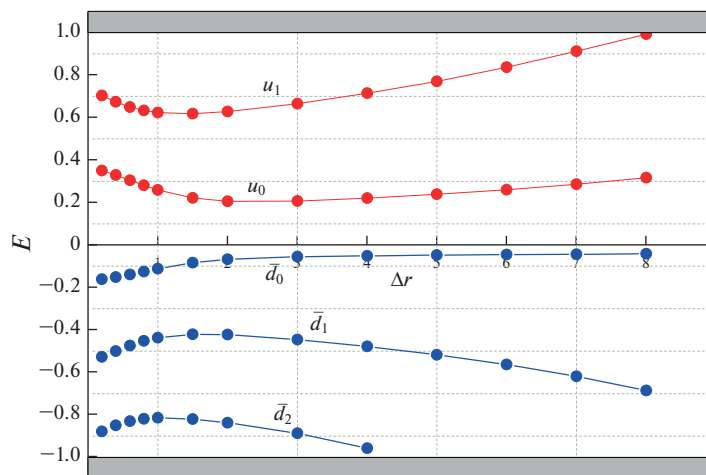


Рис. 12. Спектр $E(\Delta r)$ задачи с потенциалом $G_5(r)$.

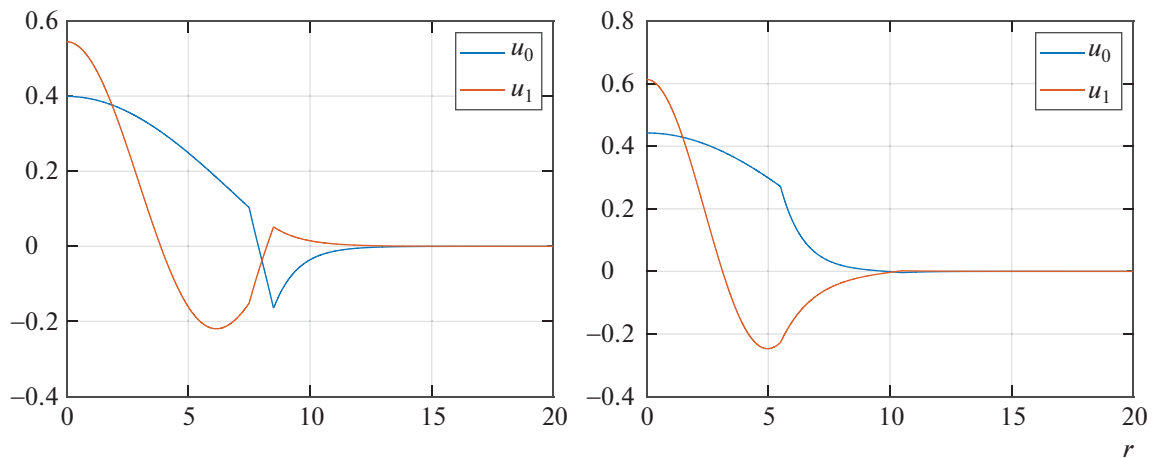


Рис. 13. Электронные волновые функции $A(r)$ в потенциале $G_5(r)$ для двух различных значений размера промежуточной области $\Delta r = r_2 - r_1$: (а) $\Delta r = 1$; (б) $\Delta r = 5$.

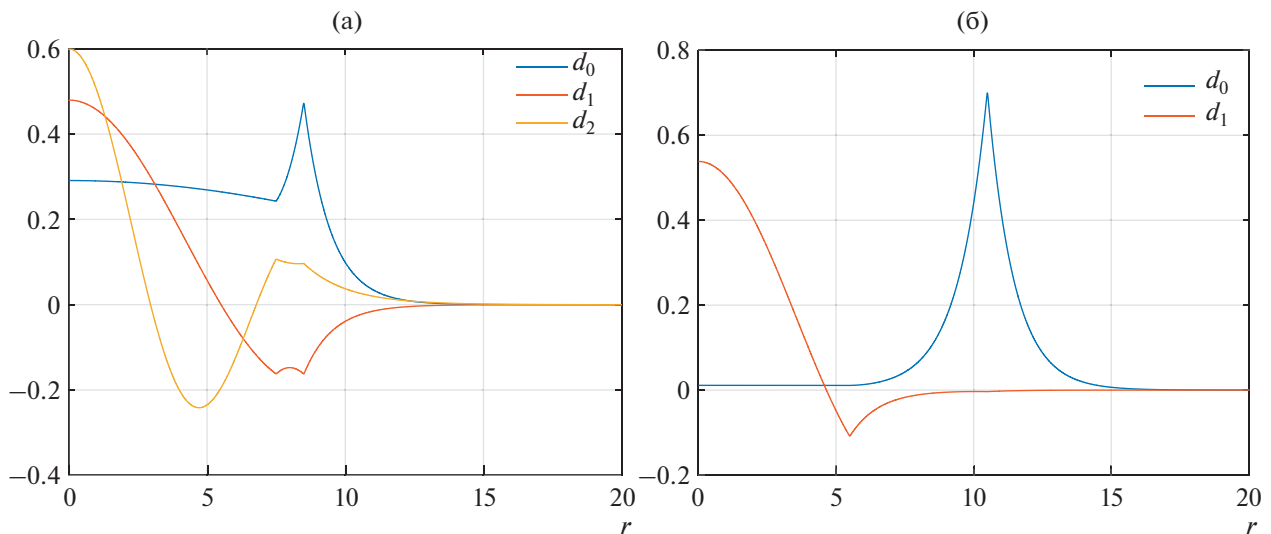


Рис. 14. Дырочные волновые функции $A(r)$ в потенциале $G_5(r)$ для двух различных значений размера промежуточной области $\Delta r = r_2 - r_1$: (а) $\Delta r = 1$; (б) $\Delta r = 5$.

жительную. Оказалось, что для достаточно больших радиусов дефекта энергия состояния пропорциональна кривизне границы дефекта.

Для всех рассмотренных задач получены зависимости энергии состояний от параметров системы — радиусов киральных переходов. Приведены качественные обоснования наблюдаемых результатов для спектральных зависимостей и форм волновых функций. Мы надеемся, что полученные результаты помогут проложить новые направления в исследовании полупроводниковых свойств графена с массовой щелью и в его технологическом применении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. *Peres N.M.R., Castro Neto A.H., Guinea F.* // Phys. Rev. B. 2006. V. 73 (24). P. 241403.
2. *Peres N.M.R. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. V. 21 (34). P. 344202.
3. *Kuru S.E., Negro J., Sourrouille L.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2018. V. 30 (36). P. 365502.
4. *Pakdel F., Maleki M.A.* // Sci. Rep. 2024. V. 14 (1). P. 14512.
5. *Geim A., Novoselov K.* // Nat. Mater. 2007. V. 6 (3). P. 183–191.
6. *Castro Neto A.H. et al.* // Rev. Mod. Phys. 2009. V. 81 (1). P. 109–162.

7. *Du X. et al.* // Nat. Nanotech. 2008. V. 3 (8). P. 491–495.
8. *Bolotin K.I. et al.* // Solid State Commun. 2008. V. 146 (9–10). P. 351–355.
9. *Ruan M. et al.* // MRS Bulletin 2012. V. 37 (12). P. 1138–1147.
10. *Zhou S.Y. et al.* // Nat. Mater. 2007. V. 6 (10). P. 770–775.
11. *Zhao J. et al.* // Nature 2024. V. 625 (7993). P. 60–65.
12. *Giovanetti G. et al.* // Phys. Rev. B 2007. V. 76 (7). P. 073103.
13. *Krasukov G.A., Pavlovsky O.V.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 2025. V. 80 (1). P. 50–59.

Quantum Wells in Graphene with a Mass Gap

G. A. Krasukov^{1, 2, *} and O. V. Pavlovsky^{1, 2, **}

¹*National Research Centre "Kurchatov Institute", Moscow, 123182 Russia*

²*Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia*

**e-mail: krasukov.ga18@physics.msu.ru*

***e-mail: pavlovsky@physics.msu.ru*

Received June 18, 2025; revised June 29, 2025; accepted July 10, 2025

Abstract—The paper considers a model of a quantum well on the basis of graphene on a substrate generating a mass gap. The analyzed situation is when there is a defect in the substrate structure, and the graphene structure remains ideal. Such a defect provides spatial inhomogeneity of the mass gap. The paper shows that the inhomogeneity of the mass gap leads to the appearance of a quantum well for both electron and hole excitations. Based on the two-dimensional Dirac field model, localized electron and hole states are investigated, their energy spectrum and wavefunctions are obtained. Various quantum wells obtained on the basis of inhomogeneities of different sizes and shapes are studied. A nontrivial dependence of localized states energy spectrum on the well parameters is shown.

Keywords: graphene, mass gap, Dirac field