

دانشکده فیزیک

#### ترابرد اسپین و بار الکترونی در صفحات دوبعدي بورفین

رساله برای دریافت درجه دکتری در رشته فیزیک گرایش ماده چگال

عرفان نیکان

استاد راهنما

دكتر اميرحسين احمدخان كردبچه



#### تأییدیهی هیأت داوران جلسهی دفاع از رساله

نام دانشکده: دانشکده فیزیک

نام دانشجو: عرفان نیکان

عنوان رساله: ترابرد اسپین و بار الکترونی در صفحات دوبعدی بورفین

تاریخ دفاع: بهمن ۱۴۰۲

رشته: فیزیک

گرایش: ماده چگال

امضا	دانشگاه یا مؤسسه	مرتبه	نام و نام	سمت	ردیف
	, ,	ر دانشگاهی	۔ خانوادگی		,
	دانشگاه	دانشيار	د <i>ک</i> تر	استاد	١
	علم و صنعت ایران		اميرحسين	راهنما	
			احمدخان		
			كردبچه		
	دانشگاه	استاد	دكتر	استاد داور	۲
	علم و صنعت ایران		ادریس فیض	داخلی	
			آبادی		
	دانشگاه	دانشيار	دكتر	استاد داور	٣
	علم و صنعت ایران		افشين نميرانيان	داخلی	
	دانشگاه	استاد	دكتر	استاد داور	۴
	پیام نور تهران		على اصغر شكري	خارجي	
	دانشگاه	استاديار	دكتر	استاد داور	۵
	شهید بهشتی		مهران باقرى	خارجي	

١

#### تأییدیهی صحت و اصالت نتایج

#### باسمه تعالى

اینجانب عرفان نیکان به شماره دانشجویی ۹۶۹۱۱۱۷ دانشجوی رشته فیزیک مقطع تحصیلی دکتری تأیید مینمایم که کلیه ی نتایج این رساله حاصل کار اینجانب و بدون هر گونه دخل و تصرف است و موارد نسخهبرداری شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کردهام. درصورت اثبات خلاف مندرجات فوق، به تشخیص دانشگاه مطابق با ضوابط و مقررات حاکم (قانون حمایت از حقوق مؤلفان و مصنفان و قانون ترجمه و تکثیر کتب و نشریات و آثار صوتی، ضوابط و مقررات آموزشی، پژوهشی و انضباطی) با اینجانب رفتار خواهد شد و حق هرگونه اعتراض درخصوص احقاق حقوق مکتسب و تشخیص و تعیین تخلف و مجازات را از خویش سلب مینمایم. در ضمن، مسؤولیت هرگونه پاسخگویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده ی اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچگونه مسؤولیتی در این خصوص نخواهد داشت.

نام و نام خانوادگی: عرفان نیکان تاریخ و امضا:

#### مجوز بهرهبرداري از پایاننامه

ه به محدودیتی که توسط	بهرهبرداری از این پایاننامه در چهارچوب مقررات کتابخانه و با توج
	ستاد راهنما به شرح زیر تعیین میشود، بلامانع است:
	🗆 بهرهبرداری از این پایاننامه برای همگان بلامانع است.
	□ بهرهبرداری از این پایاننامه با اخذ مجوز از استاد راهنما، بلامانع است.
	□ بهرهبرداری از این پایاننامه تا تاریخ
دكتر اميرحسين	استاد راهنما:
احمدخان كردبچه	
	تاريخ:
	امضا:

پدر و مادرم.

ساختار اجتماع خصوصیتی فراگیر در شبکههای پیچیده است. مسالهی یافتن اجتماعات در این شبکهها جزو مسایل مورد توجه محققین در چند سال اخیر بوده است. اجتماع مجموعهای از گرههای گراف میباشد که در عین حالی که با هم دارای اتصالات زیادی میباشند از بقیه گراف به خوبی مجزا هستند. گراف شبکههای پیچیده دارای خواص ساختاری مانند کوتاهی فاصله دو گره دلخواه هستند که آنها را از گرافهای تصادفی مطالعه شده در گذشته متمایز مینماید. از طرفی الگوریتمهای یافتن اجتماعات را می توان به دو دسته ی الگوریتمهای محلی و سراسری تقسیم کرد. یکی از چالشهای الگوریتمهای محلی انتخاب گرههای دانه است. در این پایاننامه روشی برای یافتن اجتماعات روی گراف شبکههای پیچیده به کمک انتخاب دانههای مرغوب و بسط این گرهها توسط یک الگوریتم محلی ارایه شده است. روش پیشنهادی ۳ مرحله دارد، در مرحلهی نخست گرههای گراف ورودی به کمک یک استراتژی حریصانه به چندین افراز تقسیم میشوند. این افرازها نشان دهندهی اجتماعات اولیه گراف ورودی خواهند بود. در گام دوم درون هر زیرگراف حاصل از گرههای درون یک افراز و اتصالات میان گرههای آن به دنبال گرههایی که به احتمال زیادی به خوبی در بطن یک اجتماع واقع شدهاند می گردیم. در این مرحله در هر زیر گراف به صورت موازی به کمک بررسی همسایگی گرههای با درجه بالا، گرههایی را که می توانند به خوبی نشانگر اجتماع خود باشند را به عنوان گره دانه برمی گزینیم. در گام آخر اجتماعاتی که هر گره دانه در آن قرار گرفته است را به کمک الگوریتمی که بر پایه محاسبهی بردار Personalized Pagerank عمل می کند، می یابیم. برای آزمایش کیفیت اجتماعات خروجی روش پیشنهادی خود، از ۲۲ گراف استاندارد که در ۷ دسته مختلف از شبکههای پیچیده قرار می گیرند استفاده نموده ایم. برای سنجش کیفیت اجتماعات روش پیشنهادی میزان ۵ معیار مختلف سنجش اجتماعات برای خروجی روش ما و ۳ روش دیگر آزمایش شده است. کیفیت اجتماعات روش پیشنهادی برای ۲ معیار از ۵ معیار بسیار بهتر از خروجی دیگر روشهاست، برای ۳ معیار دیگر هم عملکرد روش پیشنهادی بسیار شبیه عملکرد روش با بهترین خروجی بوده است. نتایج نشان میدهد که نباید تنها درجه یک گره را به عنوان معیار صرف دانه بودن آن انتخاب کرد.

واژگان كليدى: يافتن اجتماعات، شبكههاى پيچيده، الگوريتمهاى گراف

## فهرست مطالب

رست تصاویر	٧
رست جداول	٨
رست الگوريتمها	٩
رست علایم اختصاری	١.
ىل ١: فصل مقدمه	١
سل ۲: مروری بر ادبیات و کارهای انجام شده	۵
ىل ٣: روش پيشنهادى	٨
ىل ۴: آزمايش و نتايج	14
سل ۵: جمع بندی و پیشنهادها	۱۹
ابنامه	۲.
4.1	٧.٨

## فهرست تصاوير

### فهرست جداول

## فهرست الگوريتمها

### فهرست علايم اختصاري

$C \dots C$ اجتماعا
$\Phi$
$\Omega$
$G \ldots \ldots$ گراف
$V \ldots \ldots G$ مجموعه گرههای گراف
$E \ldots G$ مجموعه اتصالات گراف
n =  V
m= E
deg(v) $v$ درجه گره
$N_{deg(x)}$
$a_G$
CC
Dia
$Dia_{ef}$
$V_g$
$E_a \ldots q$ محموعه اتصالات گراف

فصل ۱ فصل مقدمه

گرافن اولین ماده دوبعدی کشف شده است [۱]. کشف خصوصیات حیرت انگیز گرافن مجموعه ای از مواد جدید را به وجود آورده است که به عنوان "مواد دو بعدی" شناخته می شوند [۲-۴]. فرم های دو بعدی برای بسیاری از کاربردها یک منطقه نسبتاً هیجان انگیز و جدید است [۵، ۶]. معمولاً مواد دو بعدی دارای بسیاری از خصوصیات فیزیکی برجسته هستند که برای دستگاه های الکترونیکی ، مهندسی نانو ، تبدیل انرژی و فوتونیک امیدوار کننده است [v]۱۱]. با توسعه سریع گرافن ، اخیراً مواد دو بعدی ، مانند فسفرن ، [v] ها ، ژرمن ، آنتیمونن ، سیلیسن ، آرسنن و دی الکوژنیدهای فلزات انتقالی ، مورد توجه گسترده قرار گرفته اند.

توده ای از مواد با ضخامت اتم از نظر تئوری پیش بینی یا سنتز شده است [۱۲ اید]. با کمال تعجب، آنها ساختارهای متفاوتی از گرافن دارند، این اختلاف از درجه های متفاوت خمیدگی حاصل می شود [۱۷]. علاوه بر مواد دو بعدی لایه برداری شده از نمونه های بالک، برخی از مواد دوبعدی نیز می توانند از مواد بالک بدون فرم لایه ای تولید شوند، مانند ترکیب بور تخت دوبعدی GaN 2D و هافنن [۱۸، ۱۸].

تحقیقات در مورد بور در ترکیبات مختلف را می توان به چند صد سال پیش بازگرداند ، زیرا بور دارای خاصیت فوق العاده ای است که می تواند تقریباً با تمام عناصر دیگر ترکیب شود.

در میان آنها ، نیترید بور شش ضلعی (h-BN) یک ترکیب بند وسیع ۱۱۱۰ است. این یک ماده لایه ای با ساختار گرافیت مانند است که در آن شبکه های مسطح شش ضلعی h-BN مرتباً روی هم انباشته می شوند. h-BN دارای پایداری شیمیایی بالا ، خصوصیات فیزیکی عالی و هدایت حرارتی بالایی است ایتریکی الایت دارای پایداری شیمیایی بالا ، خصوصیات فیزیکی عالی و هدایت حرارتی بالایی است ایتریکی الایت الته ایتریکی عالی و هدایت حرارتی بالایی است ایتریکی الته ایتریکی عالی و هدایت حرارتی بالایی است

در سال ۲۰۱۵ ، ورق بور 2D با موفقیت بر روی بسترهای نقره (Ag) ساخته شد [۲۵]. مطالعه بوروفن محققان زیادی را در بسیاری از زمینه ها مانند علوم مواد ، فناوری نانو ، فیزیک ، شیمی و مواد تغلیظ شده جذب کرده است [۲۷ ، ۲۶ ، ۲۷]. "Borophene" نانو صفحه جدید بور با ضخامت اتم برای سنتز در مقیاس بزرگ است [۲۸]. این سبک ترین ماده دوبعدی تا به امروز است. بوروفن همسایه گرافن است و بنابراین ، داشتن برخی از خصوصیات مشابه گرافن مطلوب است [۲۹].

هر دو الکترون  $\sigma$  و  $\pi$  در بوروفن حالات الکترونیکی سطح فرمی را اشغال می کنند و آن را ابررسانا می کنند. فشار زیاد و فشار خارجی وجود ندارد. بوروفن می تواند بالاترین  $\tau$  را در بین مواد 2D داشته باشد. برای ساختارهای بور 2D ، پیچیدگی شیمیایی و ساختاری ، خصوصیات الکترونیکی و پایداری

به طور گسترده مورد بررسی قرار گرفته است [۲۷، ۳۰، ۳۱].

اخیراً ، یک نانوساختار کاملاً فلزی مبتنی بر بور بر روی یک کریستال نقره با رسوب بخار فیزیکی ، به نام بوروفن، ساخته شده است [mg] فازهای زیادی از آلوتروپهای بور بالک و دوبعدی مانند  $\beta$  ،  $\alpha$  و غیره وجود دارد که از لحاظ نظری پیشنهاد شده اند [mg]

اگرچه ، بور از مشارکت در تشکیل پیوندهای شیمیایی برای ایجاد یک شبکه لانه زنبوری پایدار جلوگیری می کند ، اما ممکن است یک ساختار مسطح پایدار توسط مخلوطی از لانه زنبوری همراه با واحدهای مثلثی ایجاد شود [۴۳،۴۲] این ساختار شامل دو اتم در سلول واحد اولیه است که متلای ایجاد شود (۴۳،۴۲] این ساختار شامل دو اتم در یک سیستم بلوری orthorhombic نامیده می شود، که در آن Pmmn مخفف گروه فضایی ۵۹ است که در یک سیستم بلوری وجود دارد. یک و همکاران [۴۴] یک ماده جدید دیراک را پیش بینی کرد: بوروفن هیدروژنه (بوروفان) ، مشخصههای دیراک را با سرعت قابل توجه فرمی نشان می دهد که تقریبا دو برابر گرافن است.

بین نقاط و اصول و فرضیات: یک مخروط دیراک در ساختار نواری بوروفن هیدروژنه (بوروفان) بین نقاط گاما و ایکس دیده می شود، در مرجع [۴۱]. با مقایسه معادله دیراک برای ذرات با اسپین نیمه صحیح و هامیلتونی موثر بی جرم دو نوار انرژی صفحه که در انرژی های پایین معتبر است. همیلتونین مربوط  $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$  به مخروط دیراک واقع در  $k_d = (1/2)$  با معادله زیر آورده شده است:

$$H_D = v_x \sigma_x p_x + v_y \sigma_y p_y + v_t I p_x$$

جایی که  $\sigma_x$  و  $\sigma_y$  ماتریس های پاؤلی هستند و I ماتریس یکانی به بعد ۲ است. این عبارت یک مخروط دیراک D ناهمسانگرد کلی را تعریف می کند ، که با سه ثابت  $v_t$  ،  $v_y$  ،  $v_x$  توصیف می شود ، که به معنای سرعت در  $v_t$  و  $v_t$  است جهت و درجه شیب به ترتیب. قطری سازی این نتایج همیلتونین در پراکندگی انرژی است

$$\epsilon(k_x, k_y) = (k_x - k_y) \pm \sqrt{(kx_- k_y)^{\mathsf{r}} v_x^{\mathsf{r}} + k_y^{\mathsf{r}} v_y^{\mathsf{r}}}$$

طوری که شره  $v_t=-8/9\times10^{\circ}$  ، m/s  $v_y=9/97\times10^{\circ}$  ، m/s  $v_x=19/60\times10^{\circ}$  یک نمودار کانتور از مخروط ناهمسانگرد دیراک در شکل x نشان داده شده است. سرعت در جهات x مثبت و

منفی به ترتیب توسط  $v_x-|v_t|=$  ۱۴٬۵۲ × ۱۰۰ و m و m s  $v_x+|v_t|=$  ۲۴٬۶۴ × ۱۰۰ متر در ثانیه  $v_f=$  ۸٬۳۶ × ۱۰۰ و ۱٬۷۴۰ برابر سرعت فرمی گرافن هستند ( $v_t=$  ۱٬۳۹ × ۱۰۰ و ۱٬۷۴۰ برابر سرعت فرمی گرافن هستند ( $v_t=$  ۱٬۳۹ × ۱٬۹۵ و ۱٬۷۴۰ برابر سرعت فرمی گرافن هستند ( $v_t=$  ۱٬۳۹ × ۱٬۹۵ ). ( $v_t=$  سرح در ثانیه متر در ثانی در ثانیه متر در ثانی در ثانیه متر در ثانیه در ثانی در ثانی در ثانیه متر در ثانیه در ثانی د

روش ماتریس انتقال مورد بررسی قرار گرفته است [۴۵] در این تحقیق تلاش خواهیم کرد که نتایج استفاده از روش تابع گرین غیر تعادلی که در بخش پایانی به آن اشاره شده است را برای این سیستم بررسی نماییم. می توانیم با استفاده از مدل تنگ بست با اضافه کردن اثرات مختلف به همیلتونی از طریق الگوریتم محاسباتی لوپز-سانشو اثر آن را روی ترابرد بررسی نماییم.

فصل ۲

مروری بر ادبیات و کارهای انجام شده

هدف های پیش بینی شده و روش ها و ضرورت انجام طرح: ۱- بررسی ترابرد بار و اسپین در بورفین: بوروفن و گرافن به دلیل داشتن صفحات ضخیم اتمی منفرد شباهت زیادی دارند و دارای ساختار محکم زیادی هستند که انعطاف پذیری فوق العاده ای را به نمایش می گذارد. با این حال ، آنها تمایز قابل توجهی در ساختارهای شبکه خود دارند. بوروفن یک آلوتروپ کریستالی از بور است که به عنوان یک ساختار عمده دارای طبیعت غیر فلزی است. بوروفن ماده ای بسیار ناهمسانگرد است که رفتارهای نیمه رسانا و فلزی را نشان می دهد. اخیراً ، نانوساختار نویدبخش دو بعدی از نظر تئوری پیش بینی شده است و اثرات شکست تقارن سوراخ ذرات توسط هدایت نوری گزارش شده است [۴۶]. علاوه بر این ، اخیراً خواص Pmmn borophene مورد مطالعه قرار گرفته است از این ، اخیراً خواص Pmmn borophene و نشان داد که ماده ایده آل برای تجزیه و تحلیل تونل سازی کلاین در حضور ناهمسانگردی است. بعلاوه ، مشابه اثرات میدان مغناطیسی گرافن نیز در این ماده پرداخته شده است [۴۹] اما هنوز هم برای تعیین کاربردهای عملی مغناطیسی گرافن نیز در این ماده پرداخته شده است [۴۹] اما هنوز هم برای تعیین کاربردهای عملی آن به کارهای زیادی نیاز دارد.

در [۵۰] نشان داده شده است که اولا طیف انرژی الکترونیکی ناهمسانگرد است ثانیا طیف ناهمسانگرد با پتانسیل مثلث گسترش یافته است . در [۵۰] نشان داده شده است که ترکیبهای گوناگون از صفحههای بورن وجود دارد و همچنین اثرا بررسی نشده بسیاری باقیمانده است که می توان آنها را محاسبه کرد.

۲- بررسی ترابرد درهای در صفحات بروفین: در یک جامد بلوری ، رابطه بین انرژی الکترون و حرکت بلوری آن توسط ساختار باند الکترونیکی ماده اداره می شود. حداقل محلی در باند هدایت یا حداکثر محلی در باند ظرفیت به عنوان یک دره شناخته می شود. علاوه بر شارژ و چرخش ، یک الکترون دارای درجه آزادی دره نیز می باشد که دره ای را که الکترون اشغال می کند مشخص می کند. امکان استفاده از درجه آزادی دره برای ذخیره سازی و حمل اطلاعات (مشابه اسپین در اسپین ترونیک) منجر به کاربردهای الکترونیکی مفهومی می شود که به عنوان valleytronics [۲۵-هیآشناخته می شوند. یک سیستم ماده ولیترونیک ایده آل دارای یک ساختار باند متشکل از دو (یا بیشتر) دره تبهگن اما نابرابر (نقاط اکسترمم طیف انرژی محلی) است که می تواند برای رمزگذاری ، پردازش و ذخیره اطلاعات به کار گرفته شود.

ایده بکارگیری درجه آزادی دره الکترونیکی چیز جدیدی نیست. به عنوان مثال ، کاملاً شناخته شده است که می توان از کرنش برای تنظیم انرژی دره ها استفاده کرد ، که یک روش گسترده در صنعت الکترونیک نیمه هادی برای افزایش تحرکات حامل است.[۵۴] در تحقیقات اساسی تر ، نیمه هادی های سنتی ، مانند سیلیکون و آلومینیوم آرسنید (AIAs) ، که دارای چندین دره در باند های هدایت واقع در یا در نزدیکی نقاط تقارن X در منطقه بریلوین هستند ، مورد بررسی قرار گرفته اند. کارهای اولیه بررسی درجه آزادی دره به دهه ۱۹۷۰ برمی گردد ، با مطالعاتی در مورد لایه های وارونگی در اتصالهای سیلیکون/عایق [۵۶؛۵۵].

در این مواد ۲ بعدی شش ضلعی ، مانند گرافن و تک لایه گروه VI که فلزی را ساندویچ کرده است. (WSe2 و WS2 ، MoSe2 ، MoSe2 ، MoSe2 به باند تحت است. (TMD) (به عنوان مثال مثال مثال K و WSe2 و WS2 ، MoSe2 ، MoSe2 به باند تحت سلطه دو دره ناموزون هستند که در نقاط K و K و K و K منطقه بریلوئن قرار دارند. (شکل K) این دره ها را می توان با یک شبه اسپین دودویی نشان داد که مانند سیستم K و K الکترونهای موجود در دره K می توانند به عنوان شبه ذره اسپین بالا ، و الکترونهای موجود در دره K می توانند به عنوان دراسپین پایین برچسب گذاری شوند. بنابراین ، در یک سیستم دوپینگ ، یک توزیع جمعیت حامل قطبی در یک دره K می تواند اطلاعات باینری را ذخیره کند.

اعمال میدان الکتریکی در بخش باریک شکل فوق تراز فرمی را در این بازه جابجا می کند. در این نوار انرژی در سه بخش مختلف نوار به شکل زیر در می آید:

در مرجع مذکور نشان داده شده است که با بالا بردن تراز فرمی در محدوده کانال، الکترونهایی که دارای اندیس دره ی منفی هستند (دایره های تو خالی) به طور کامل منعکس شده و الکترونهایی که از لید راست خارج می شوند پلاریزاسیون دره ای کامل خواهند داشت. به همین ترتیب اگر میدان الکتریکی منفی اعمال کنیم تراز فرمی کانال پایین تر از تراز فرمی لیدها قرار گرفته و مسیر الکترونهای دارای اندیس مثبت به طور کامل سد میشود. (شکل ۳) لذا از این رفتار میتوان برای آشکار سازی جریان پلاریزه دره ای استفاده کنیم.

اثر ولی ترونیک در بسیاری از مواد دوبعدی جدید به همراه اثرها و برهمکنشهای گوناگون بررسی شده است. این مهم در بروفین هنوز به انجام نرسیده است.

فصل ۳

روش پیشنهادی

روش مود مچینگ: سازه های موجدار با ناپیوستگی های طولی در بسیاری از کاربردها نقش دارند. تجزیه و تحلیل ناپیوستگی های راهنمای موج از اهمیت بالایی برخوردار است. یک رویکرد قدر تمند، روش تطبیق حالت (MMT) است که با استفاده از آن حالتهای موجی راهنما زمینه ها را توصیف می کنند و سپس شرایط مرزی که باید زمینه های مماس در سطح مقطع ساختار هدایتگر موج داشته باشند، در رابط اعمال می شوند. بین بخشهای مختلف موجبر. در MMT، ساختار مورد بررسی به زیرسازی های ساده تری تقسیم می شود که حالت های آن (ویژه توابع) مشخص است یا می توان آنها را تعیین کرد. میدان های الکتریکی و مغناطیسی ناشناخته با مجموع حالت های ویژه با ضرایب ناشناخته تقریبی می شوند. وقتی این عملکردها حالت عادی دارند، از آنها به عنوان حالت های طبیعی یاد می شود. گسترش سری، همه شرایط مرزی مشکل را برآورده می کند، به جز مواردی که در رابط های بین مناطق فرعی مجاور وجود دارد. سپس ضرایب انبساط ناشناخته از شرایط مرزی در رابط ها تعیین می شود.

ترابرد ، دره و اسپین را در یک اتصال سیلیسن طبیعی / فرومغناطیسی / طبیعی در [۵۸]بررسی شده است. یوکوماما نشان داده است که رسانایی بار ، دره و اسپین در این محل اتصال با طول سیلیسن فرو مغناطیسی نوسان می کند. می توانیم از آن برای بروفین نیز استفاده کنیم.

ماتریس انتقال و الگوریتم لوپزسانشو برای محاسبه ترابرد از آنجایی که در توضیح اثرات ابرشبکه بر روی خواص ترابرد ترکیبات دو بعدی از روش ماتریس انتقال استفاده خواهیم کرد در زیر به مرور نحوه کاربرد این مدل برای توصیف سیتمهای ساده تر مثل گرافین تک لایه تحت تأثیر پتانسیل پله ای دوره ای به نحوی که در شکل ۱ مشخص گردید، میپردازیم.

قسمت بالایی شکل طیف انرژی شبه ذرات را در طول گرافین تک لایه نشان میدهد. از آنجایی که انرژی فرمی بین دو نوار گرافینی کنار هم متفاوت است، الگوی پتانسیل سیستم به شکل چاه های پتانسیل متوالی با استفاده از رابطه زیر قابل توصیف است

$$V(x) = \begin{cases} V_{\cdot} & l_{(\forall i-1) < |x| < l_{\forall i}} & i = 1, \forall, \dots \\ & & \text{Otherwise} \end{cases}$$

این شکل پتانسیل مشابه همان شکلی است که در ابرشبکه های مبتنی بر نیمرسانا های معمولی اتفاق میافتد. تفاوت اساسی سیستم ما در این خواهد بود که رفتار حامل های بار به جای معادله شرودینگر از معادله دیراک تبعیت میکند که همیلتونی آن را میتوان به شکل زیر نوشت

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \sigma \nabla + V(x)$$

که در آن ۱۰۶ می سرعت فرمی و  $\sigma(\sigma_x,\sigma_y)$ ماتریس های پائولی هستند. الکترونها و حفره ها در نیمرساناها معمولا توسط دو معادله شرودینگر جداگانه که با یکدیگر ارتباطی ندارند توصیف می شوند. اما در سیستم های دو بعدی نظیر این سیستم الکترونها و حفره ها رفتار مرتبط با یکدیگر دارند و دارای خصوصیات کایرال می باشند. به این ترتیب که با یک تابع موج دو مؤلفه ای (توابع اسپینور) توصیف می شوند.

برای محاسبه ترابرد سیستمی که با همیلتونی رابطه ۲ توصیف می شود، با در نظر گرفتن پاسخ کلی به صورت موج تختی که با زاویه معینی در جهت ابر شبکه حرکت می کند، مؤلفه های اسپینور دیراک بدست می آید. سپس با اعمال شرط پیوستگی تابع موج در مرز بین نوارهای مختلف ماتریس انتقال در اینترفیس دو ناحیه مجاور بدست می آید. از حاصلضرب ماتریس های انتقال ماتریس انتقال ابر شبکه به صورت زیر حاصل می شود:

$$S(z) = S(z = l_{r}) = S(z = l_{r}) = \dots S(z = l_{i}) \dots S(z = l_{n-1})$$

$$S(z = l_{i}) = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{11} \\ t_{11} & t_{11} \end{bmatrix}$$

$$(1-r)$$

به این ترتیب احتمال عبور موج به صورت تابعی از زاویه برخورد بدست میآید که برای این سیستم رابطه زیر بدست میآید:

$$T(\phi) = \frac{e^{-\mathbf{r}ik_x/D - q(D+L)(\mathbf{r} + e^{\mathbf{r}i\theta})^{\mathsf{r}}(\mathbf{r} + e^{\mathbf{r}i\phi})^{\mathsf{r}}}}{A_{\mathsf{r}}^{\mathsf{r}} + B_{\mathsf{r}}^{\mathsf{r}}} \tag{Y-r}$$

پس از بدست آمدن ضرایب عبور میتوان با استفاده از رابطه بوتیکر رسانش سیستم را بدست آورد:

$$G = G. \int_{-\pi/\mathbf{Y}}^{\pi/\mathbf{Y}} T(E, \sqrt{\mathbf{Y}E} sin\phi) cos\phi d\phi \tag{\Upsilon-\Upsilon}$$

که در آن $G.=e^\intercal m v_F w/\hbar^\intercal$ که در

روش لوپز-سانشو برای محاسبه ترابرد در سیستمهایی که در یک بعد شرط مرزی بلاخ را رعایت می کنند دارای همگرایی بالایی است و توان محاسباتی کمی نیاز دارد. برای توضیح روش فرض می کنیم یک نانونوار گرافینی در یک بعد دارای ساختار تناوبی می باشد. ابتدا باید به کمک هامیلتونی TB ماتریس برهمکنش یک سوپرسل با خودش  $H_{\cdot,\cdot}$  را محاسبه و همچنین برهمکنش یک سوپرسل با سلول مجاورش  $H_{\cdot,\cdot}$  را محاسبه کنیم.

حال به کمک ماتریس های فوق و روش لوپز خود انرژی الکترودهای طرفین را محاسبه می کنیم. برای این کار ابتدا توابع گرین سطحی الکترودها را محاسبه می کنیم.

$$\begin{split} g^L_{\cdot,\cdot} &= \left[E^+I - H_{\cdot,\cdot} - H^\dagger_{-1,\cdot}\right]^{-1} \\ g^R_{M+1,M+1} &= \left[E^+I - H_{\cdot,\cdot} - H^\dagger_{-1,\cdot}\right]^{-1} \end{split} \tag{F-T)}$$

در روابط فوق  $E^+=E+i\eta$  میباشد که  $\eta$  مقدار کوچکی است که برای فرار از تکینگی به کار میبریم. برای استفاده از روابط فوق نیاز داریم ماتریس های انتقال را محاسبه کنیم. برای این کار از یک روش تکرار استفاده می شود.

$$\begin{split} &\Lambda = t_{\cdot} + \hat{t}_{\cdot} t_{\gamma} + \hat{t}_{\cdot} \hat{t}_{\gamma} t_{\gamma} + \dots \hat{t}_{\cdot} \hat{t}_{\gamma} \hat{t}_{\gamma} \dots t_{n} \\ &\hat{\Lambda} = \hat{t}_{\cdot} + t_{\cdot} \hat{t}_{\gamma} + \hat{t}_{\cdot} \hat{t}_{\gamma} t_{\gamma} + \dots t_{\cdot} t_{\gamma} t_{\gamma} \dots \hat{t}_{n} \end{split}$$

که در آن  $t_i$  و  $\hat{t}_i$  به نحو زیر تعریف می شوند:

$$t_{i} = (I - t_{i-1}\hat{t}_{i-1} - \hat{t}_{i-1}t_{i-1})^{-1}t_{i-1}^{\mathsf{Y}}$$

$$\hat{t}_{i} = (I - t_{i-1}\hat{t}_{i-1} - \hat{t}_{i-1}t_{i-1})^{-1}\hat{t}_{i-1}^{\mathsf{Y}}$$

$$(9-\mathbf{Y})$$

و به ازای مقدار  $i=\cdot$  داریم:

$$t_{\cdot \cdot} = (E^{+}I - H_{\cdot, \cdot})^{-1} H_{-1, \cdot}^{\dagger}$$

$$t_{\cdot \cdot} = (E^{+}I - H_{\cdot, \cdot})^{-1} H_{-1, \cdot}$$
(Y-r)

با در نظر گرفتن سوپرسل نمونه به عنوان قسمتی از لید چپ به صورت لایه به لایه ( از M=1 تا M=1 می توانیم تابع گرین سطحی را بدست آوریم:

$$g_{l,l}^{R} = \left[ E^{+}I - H_{l,l} - H_{l,l}g_{l+1,l+1}^{R}H_{l,l+1}^{\dagger} \right]^{-1} \tag{A-T}$$

پس از آن تابع گرین کل از رابطه زیر قابل محاسبه خواهد بود:

$$G_{11} = \left[E^{+}I - H_{1,1} - \Sigma^{L} - \Sigma^{R}\right] \tag{9-7}$$

که در آن:

$$\begin{split} \Sigma^L &= H^\dagger_{\cdot, \cdot, \cdot} g^L_{\cdot, \cdot} H_{\cdot, \cdot, \cdot} \\ \Sigma^R &= H_{\cdot, \cdot, \cdot} g^R_{\cdot, \cdot, \cdot} H^\dagger_{\cdot, \cdot, \cdot} \end{split} \tag{1.-7}$$

خود انرژیهای مربوط به برهمکنش با لیدهای چپ و راست هستند. از تابع گرین میتوان چگالی حالتهای جایگزیده (LDOS) را نیز بدست آورد:

$$n_j = -\frac{1}{\pi} Im[G_{(j,j)}] \tag{11-r}$$

که اندیس j,jیه سایت مورد نظر اشاره می کند. در نهایت با استفاده از فرمول لانداور می تواند رسانش را بدست آورد:

$$G_{(E)} = \frac{\mathbf{Y}e^{\mathbf{Y}}}{h}T_{(E)} \tag{1Y-P}$$

که در آن از روابط زیر برای محاسبه احتمال عبور استفاده شده است:

$$\begin{split} T_{(E)} &= Tr[\Gamma^L G_{"} \Gamma^R G_{","}^{\dagger}] \\ \Gamma^{L,R} &= i[\Sigma^{L,R} - (\Sigma^{L,R})^{\dagger}] \end{split} \tag{17-7}$$

به این ترتیب هزینه محاسباتی این سیستم 1Nx۲ به طور خطی با N تغییر می کند. این روش را به راحتی می توان با تنظیم پارامترهای هاپینگ و آنسایت به ابر شبکه ها تعمیم داد به طوری که سوپر سل حاوی یک دوره تناوب ابر شبکه باشد.

فصل ۴

آزمایش و نتایج

در اینجا یک متن فارسی می نویسم که میخواهم هم داشته باشد. به عنوان مثال این کلمات کلیدی هستند. دیگران چگونه میکنند

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی

تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم

افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

لورم ایپسوم متن ساختگی با تولید سادگی نامفهوم از صنعت چاپ و با استفاده از طراحان گرافیک است. چاپگرها و متون بلکه روزنامه و مجله در ستون و سطرآنچنان که لازم است و برای شرایط فعلی تکنولوژی مورد نیاز و کاربردهای متنوع با هدف بهبود ابزارهای کاربردی می باشد. کتابهای زیادی در شصت و سه درصد گذشته، حال و آینده شناخت فراوان جامعه و متخصصان را می طلبد تا با نرم افزارها شناخت بیشتری را برای طراحان رایانه ای علی الخصوص طراحان خلاقی و فرهنگ پیشرو در زبان فارسی ایجاد کرد. در این صورت می توان امید داشت که تمام و دشواری موجود در ارائه راهکارها و شرایط سخت تایپ به پایان رسد وزمان مورد نیاز شامل حروفچینی دستاوردهای اصلی و جوابگوی سوالات پیوسته اهل دنیای موجود طراحی اساسا مورد استفاده قرار گیرد.

فصل ه

جمع بندی و پیشنهادها

#### كتابنامه

- [1] V. D. Blondel, J. L. Guillaume, R. Lambiotte, and E. Lefebvre, "Fast unfolding of communities in large networks," Journal of statistical mechanics: theory and experiment, vol.2008, no.10, p.P10008, 2008.
- [2] J. Reichardt and S. Bornholdt, "Statistical mechanics of community detection," Physical Review E, vol.74, no.1, p.016110, 2006.
- [3] A. Clauset, M. E. Newman, and C. Moore, "Finding community structure in very large networks," Physical review E, vol.70, no.6, p.066111, 2004.
- [4] C. Biemann, "Chinese whispers: an efficient graph clustering algorithm and its application to natural language processing problems," in Proceedings of the first workshop on graph based methods for natural language processing, pp.73–80, Association for Computational Linguistics, 2006.
- [5] J. Kleinberg and E. Tardos. Algorithm Design. Boston, MA, USA: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 2005.
- [6] S. Fortunato and M. Barthelemy, "Resolution limit in community detection," Proceedings of the National Academy of Sciences, vol.104, no.1, pp.36–41, 2007.
- [7] J. Yang and J. Leskovec, "Overlapping community detection at scale: a nonnegative matrix factorization approach," in Proceedings of the sixth ACM international conference on Web search and data mining, pp.587–596, ACM, 2013.
- [8] M. G. Everett, "Classical algorithms for social network analysis: Future and current trends," in Encyclopedia of Social Network Analysis and Mining, pp.88–94, hhhhh, 2014.
- [9] J. Leskovec, K. J. Lang, and M. Mahoney, "Empirical comparison of algorithms for network community detection," in Proceedings of the 19th international conference on World wide web, pp.631–640, ACM, 2010.

- [10] D. Hric, R. K. Darst, and S. Fortunato, "Community detection in networks: Structural communities versus ground truth," Physical Review E, vol.90, no.6, p.062805, 2014.
- [11] M. E. Newman, "Communities, modules and large-scale structure in networks," Nature Physics, vol.8, no.1, pp.25–31, 2012.
- [12] D. Easley and J. Kleinberg. Networks, crowds, and markets reasoning about a highly connected world. New York: Cambridge University Press, 2010.
- [13] S. L. Tauro, C. Palmer, G. Siganos, and M. Faloutsos, "A simple conceptual model for the internet topology," in Global Telecommunications Conference, 2001. GLOBECOM'01. IEEE, vol.3, pp.1667–1671, IEEE, 2001.
- [14] K. H. Rosen. Handbook of Discrete and Combinatorial Mathematics, Second Edition. Chapman & Hall/CRC, 2nd ed., 2010.
- [15] U. N. Raghavan, R. Albert, and S. Kumara, "Near linear time algorithm to detect community structures in large-scale networks," Physical Review E, vol.76, no.3, p.036106, 2007.
- [16] H. Shen, X. Cheng, K. Cai, and M.-B. Hu, "Detect overlapping and hierarchical community structure in networks," Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, vol.388, no.8, pp.1706–1712, 2009.
- [17] I. M. Kloumann and J. M. Kleinberg, "Community membership identification from small seed sets," in Proceedings of the 20th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining, pp.1366–1375, ACM, 2014.
- [18] J. Yang, J. McAuley, and J. Leskovec, "Community detection in networks with node attributes," in Data mining (ICDM), 2013 ieee 13th international conference on, pp.1151–1156, IEEE, 2013.
- [19] A. Clauset, C. R. Shalizi, and M. E. Newman, "Power-law distributions in empirical data," SIAM review, vol.51, no.4, pp.661–703, 2009.
- [20] P. Pons and M. Latapy, "Computing communities in large networks using random walks," in Computer and Information Sciences-ISCIS 2005, pp.284–293, Springer, 2005.
- [21] M. E. Newman and M. Girvan, "Finding and evaluating community structure in networks," Physical review E, vol.69, no.2, p.026113, 2004.
- [22] A. Clauset, "Finding local community structure in networks," Physical review E, vol.72, no.2, p.026132, 2005.

- [23] D. Gibson, J. Kleinberg, and P. Raghavan, "Inferring web communities from link topology," in Proceedings of the ninth ACM conference on Hypertext and hypermedia: links, objects, time and space—structure in hypermedia systems: links, objects, time and space—structure in hypermedia systems, pp.225–234, ACM, 1998.
- [24] J. M. Kleinberg, "Authoritative sources in a hyperlinked environment," Journal of the ACM (JACM), vol.46, no.5, pp.604–632, 1999.
- [25] Y. J. Wu, H. Huang, Z. F. Hao, and F. Chen, "Local community detection using link similarity," Journal of computer science and technology, vol.27, no.6, pp.1261–1268, 2012.
- [26] Q. Chen and M. Fang, "An efficient algorithm for community detection in complex networks," in the 6th Workshop on Social Network Mining and Analysis, 2012.
- [27] U. N. Raghavan, R. Albert, and S. Kumara, "Near linear time algorithm to detect community structures in large-scale networks," Physical Review E, vol.76, no.3, p.036106, 2007.
- [28] J. Yang and J. Leskovec, "Defining and evaluating network communities based on ground-truth," Knowledge and Information Systems, vol.42, no.1, pp.181–213, 2015.
- [29] V. D. Blondel, J. L. Guillaume, R. Lambiotte, and E. Lefebvre, "Fast unfolding of communities in large networks," Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, vol.2008, no.10, p.P10008, 2008.
- [30] L. G. Jeub, P. Balachandran, M. A. Porter, P. J. Mucha, and M. W. Mahoney, "Think locally, act locally: Detection of small, medium-sized, and large communities in large networks," Physical Review E, vol.91, no.1, p.012821, 2015.
- [31] B. Collingsworth and R. Menezes, "A self-organized approach for detecting communities in networks," Social Network Analysis and Mining, vol.4, no.1, pp.1–12, 2014.
- [32] C. L. Staudt, Y. Marrakchi, and H. Meyerhenke, "Detecting communities around seed nodes in complex networks," in Big Data (Big Data), 2014 IEEE International Conference on, pp.62–69, IEEE, 2014.
- [33] S. Harenberg, G. Bello, L. Gjeltema, S. Ranshous, J. Harlalka, R. Seay, K. Padmanabhan, and N. Samatova, "Community detection in large-scale networks: a survey and empirical evaluation," Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics, vol.6, no.6, pp.426–439, 2014.
- [34] J. P. Bagrow and E. M. Bollt, "Local method for detecting communities," Physical Review E, vol.72, no.4, p.046108, 2005.

- [35] F. Moradi, T. Olovsson, and P. Tsigas, "A local seed selection algorithm for overlapping community detection," in Advances in Social Networks Analysis and Mining (ASONAM), 2014 IEEE/ACM International Conference on, pp.1–8, IEEE, 2014.
- [36] B. Viswanath, A. Mislove, M. Cha, and K. P. Gummadi, "On the evolution of user interaction in facebook," in Proceedings of the 2nd ACM workshop on Online social networks, pp.37–42, ACM, 2009.
- [37] J. J. Whang, D. F. Gleich, and I. S. Dhillon, "Overlapping community detection using neighborhood-inflated seed expansion," Transactions on Knowledge and Data Engineering, p.Accepted, 2016.
- [38] A. L. Barabási and R. Albert, "Emergence of scaling in random networks," science, vol.286, no.5439, pp.509–512, 1999.
- [39] S. Fortunato, "Community detection in graphs," Physics Reports, vol.486, no.3, pp.75–174, 2010.
- [40] J. Xie, S. Kelley, and B. K. Szymanski, "Overlapping community detection in networks: The state-of-the-art and comparative study," ACM Computing Surveys (csur), vol.45, no.4, p.43, 2013.
- [41] D. Eppstein and D. Strash, "Listing all maximal cliques in large sparse real-world graphs," in Experimental Algorithms, pp.364–375, Springer, 2011.
- [42] E. Estrada and J. A. Rodriguez-Velazquez, "Subgraph centrality in complex networks," Physical Review E, vol.71, no.5, p.056103, 2005.
- [43] D. A. Spielman and S. H. Teng, "Nearly-linear time algorithms for graph partitioning, graph sparsification, and solving linear systems," in Proceedings of the thirty-sixth annual ACM symposium on Theory of computing, pp.81–90, ACM, 2004.
- [44] F. Radicchi, C. Castellano, F. Cecconi, V. Loreto, and D. Parisi, "Defining and identifying communities in networks," Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, vol.101, no.9, pp.2658–2663, 2004.
- [45] D. J. Watts and S. H. Strogatz, "Collective dynamics of 'small-world' networks," nature, vol.393, no.6684, pp.440–442, 1998.
- [46] B. Abrahao, S. Soundarajan, J. Hopcroft, and R. Kleinberg, "On the separability of structural classes of communities," in Proceedings of the 18th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining, pp.624–632, ACM, 2012.

- [47] R. Andersen, F. Chung, and K. Lang, "Local graph partitioning using pagerank vectors," in Foundations of Computer Science, 2006. FOCS'06. 47th Annual IEEE Symposium on, pp.475–486, IEEE, 2006.
- [48] J. J. Whang, D. F. Gleich, and I. S. Dhillon, "Overlapping community detection using seed set expansion," in Proceedings of the 22nd ACM international conference on Conference on information & knowledge management, pp.2099–2108, ACM, 2013.
- [49] R. A. Rossi and N. K. Ahmed, "The network data repository with interactive graph analytics and visualization," in Proceedings of the Twenty-Ninth AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2015.
- [50] R. A. Rossi and N. K. Ahmed, "The network data repository with interactive graph analytics and visualization," in Proceedings of the Twenty-Ninth AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2015.
- [51] D. F. Gleich and C. Seshadhri, "Vertex neighborhoods, low conductance cuts, and good seeds for local community methods," in Proceedings of the 18th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining, pp.597–605, ACM, 2012.

### نمایه

۴	مثال	
۱۵	نشانه	
		آینده
\\ \ \ \	چاپ	اریه
		سلام
		فارسی

#### Abstract:

Exploring community structure is an appealing problem that has been drawing much attention in the recent years. One serious problem regarding many community detection methods is that the complete information of real-world networks usually may not be available most of the time, also considering the dynamic nature of such networks(e.g. web pages, collaboration networks and users friendships on social networks), it is most probable possibility that one could detect community structure from a certain source vertex with limited knowledge of the entire network. The existing approaches can do well in measuring the community quality, Nevertheless they are largely dependent on source vertex chosen for the process. Additionally, using unsuitable seed vertices may lead to finding of low quality or erroneous communities for output of many of the algorithms. This paper proposes a method to find better source vertices to be used as seeds to construct community structures locally. Inspired by the fact that many gargantuan real-world networks and respectively their graphs contain a myriad of lightly connected vertices, we explore community structure heuristically by giving priority to vertices which have a high number of links pertaining to the core structure of the network. Experimental results prove that our method can perform effectively for finding high quality seed vertices.

Keywords: Borophene, NEGF,



### Iran University of Science and Technology Physics Department

# Valley polarized electronic and spintronic transport in 2D boron sheets

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirement for the Degree of Master of Science in Ph.D

By:

Erfan Nikan

**Supervisor:** 

Dr. Amirhossein Ahmadkhan Kordbacheh

February 2024