



دانشکده فیزیک

ترابرد اسپین و بار الکترونی در صفحات دوبعدی بورفین

رساله برای دریافت درجه دکتری در رشته فیزیک
گرایش ماده چگال

عرفان نیکان

استاد راهنما

دکتر امیرحسین احمدخان کردبچه

بهمن ۱۴۰۲



تأییدی هیأت داوران جلسه 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

ردیف	سمت	نام و نام خانوادگی	مرتبه دانشگاهی	دانشگاه یا مؤسسه	امضاء
۱	استاد راهنما	دکتر امیرحسین احمدخان کردبچه	دانشیار	دانشگاه علم و صنعت ایران	
۲	استاد داور داخلی	دکتر ادریس فیض آبادی	استاد	دانشگاه علم و صنعت ایران	
۳	استاد داور داخلی	دکتر افشین نمیرانیان	دانشیار	دانشگاه علم و صنعت ایران	
۴	استاد داور خارجی	دکتر علی اصغر شکری	استاد	دانشگاه پیام نور تهران	
۵	استاد داور خارجی	دکتر مهران باقری	استادیار	دانشگاه شهید بهشتی	

تأییدی صحت و اصالت نتایج

باسمه تعالی

اینجانب عرفان نیکان به شماره دانشجویی ۹۶۹۱۱۱۷ دانشجوی رشته فیزیک مقطع تحصیلی دکتری تأیید می‌نمایم که کلیه‌ی نتایج این رساله حاصل کار اینجانب و بدون هرگونه دخل و تصرف است و موارد نسخه‌برداری شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کرده‌ام. در صورت 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، مسئولیت هرگونه پاسخگویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی‌صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده‌ی اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچ‌گونه مسئولیتی در این خصوص نخواهد داشت.

نام و نام خانوادگی: عرفان نیکان

تاریخ و امضا:

مجوز بهره‌برداری از پایان‌نامه

- بهره‌برداری از این پایان‌نامه در چهارچوب مقررات کتابخانه و با توجه به محدودیتی که توسط استاد 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 ممنوع است.

استاد راهنما: دکتر امیرحسین

احمدخان کردبچه

تاریخ:

امضا:

تقديم به:

پدر و مادرم.

چکیده

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 می‌توان به دو دسته‌ی 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 ارائه شده است. روش پیشنهادی ۳ مرحله دارد، در مرحله‌ی نخست گره‌های گراف ورودی به کمک یک استراتژی حریصانه به چندین افراز تقسیم می‌شوند. این افرازاها 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 می‌گردیم. در این مرحله در هر زیرگراف به صورت موازی به کمک بررسی همسایگی گره‌های با درجه بالا، گره‌هایی را که می‌توانند به خوبی نشانگر اجتماع خود باشند را به عنوان گره دانه برمی‌گزینیم. 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 می‌کند، می‌یابیم. برای آزمایش کیفیت اجتماعات خروجی روش پیشنهادی خود، از ۲۲ گراف استاندارد که در ۷ دسته مختلف از شبکه‌های پیچیده قرار می‌گیرند 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 کلیدی: یافتن اجتماعات، شبکه‌های پیچیده، الگوریتم‌های گراف

فهرست مطالب

چ	فهرست تصاویر
ح	فهرست جداول
خ	فهرست الگوریتم‌ها
د	فهرست علائم اختصاری
۱	فصل ۱: فصل مقدمه
۵	فصل ۲: مروری بر ادبیات و کارهای انجام شده
۸	فصل ۳: روش پیشنهادی
۱۴	فصل ۴: آزمایش و نتایج
۱۵	فصل ۵: جمع‌بندی و پیشنهادها
۱۶	کتاب‌نامه
۲۱	واژه‌نامه فارسی به انگلیسی
۲۲	واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

فهرست تصاویر

فهرست جداول

فهرست الگوریتم‌ها

فهرست علایم اختصاری

C	اجتماع
Φ	رسانش
Ω	ماژولاریتی
G	گراف
V	مجموعه گره‌های گراف G
E	مجموعه اتصالات گراف G
$n = V $	تعداد گره‌ها
$m = E $	تعداد یال‌ها
$deg(v)$	درجه گره v
$N_{deg(x)}$	تعداد گره‌هایی که x یال دارند
a_G	میانگین تعداد یال‌های هر گره گراف G
CC	Clustering Coefficient
Dia	قطر حقیقی گراف
Dia_{ef}	قطر موثر گراف
V_g	مجموعه گره‌های گراف g
E_g	مجموعه اتصالات گراف g

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 [۷-۱۱]. با توسعه سریع گرافن، اخیراً مواد دو بعدی، مانند فسفرن، BN، ژرمن، آنتیمون، سیلیسن، آرسن و دی الکتریدهای فلزات انتقالی، مورد توجه گسترده قرار گرفته اند.

توده ای از مواد با ضخامت اتم از نظر تئوری پیش بینی یا سنتز شده است [۱۲-۱۶]. 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 هافن [۱۸، ۱۹].

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، نیتريد بور شش ضلعی (h-BN) یک ترکیب بند وسیع III-V 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 [۲۰-۲۳].

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 [۱۳، 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 σ و π 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 Tc 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 [۳۲-۳۶]. فازهای زیادی از آلوتروپهای بور بالک و دوبعدی مانند α ، β و غیره وجود دارد که از لحاظ نظری پیشنهاد شده اند [۳۷-۳۹].

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 [۴۲، ۴۳] این ساختار شامل دو اتم در سلول واحد اولیه است که 2B:Pmmn نامیده می شود، که در آن Pmmn مخفف گروه فضایی ۵۹ است که در یک سیستم بلوری orthorhombic وجود دارد. Xu و همکاران [۴۴] یک ماده جدید دیراک را پیش بینی کرد: بوروفن هیدروژنه (بوروفان) ، مشخصه های دیراک را با سرعت قابل توجه فرمی نشان می دهد که تقریباً دو برابر گرافن است.

ب) 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. هامیلتونین مربوط به مخروط دیراک واقع در $k_d = (0.6400)^{-1}$ 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 σ_x و σ_y ماتریس های پاولی هستند و I ماتریس یکانی به بعد ۲ است. این عبارت یک مخروط دیراک 2D ناهمسانگرد کلی را تعریف می کند، که با سه ثابت v_x ، v_y ، v_t توصیف می شود، که به معنای سرعت در x و y است جهت و درجه شیب به ترتیب. قطری سازی این نتایج هامیلتونین در پراکندگی انرژی است

$$\epsilon(k_x, k_y) = (k_x - k_y) \pm \sqrt{(k_x - k_y)^2 v_x^2 + k_y^2 v_y^2}$$

طوری که $v_t = 5.06 \times 10^5$ m/s، $v_y = 6.32 \times 10^5$ m/s، $v_x = 19.58 \times 10^5$ m/s. یک نمودار کانتور از مخروط ناهمسانگرد دیراک در شکل ۴ نشان داده شده است. سرعت در جهات x مثبت و

منفی به ترتیب توسط $v_x + |v_t| = 24/64 \times 10^5$ m/s و $v_x - |v_t| = 14/52 \times 10^5$ متر در ثانیه $v_f = 8/36 \times 10^5$ و v_y برابر با $1/74, 2/95$ و $0/76$ برابر سرعت فرمی گرافن هستند (۴۱). (m/s)

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 *ab initio* 8-Pmmn borophene مورد مطالعه قرار گرفته است [۴۷] و Li و همکاران. [۴۸] طیف انرژی 8-Pmmn borophene را بدست آورد 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 آن به کارهای زیادی نیاز دارد.

در [۵۰] نشان داده شده است که اولاً طیف انرژی الکترونیکی ناهمسانگرد است ثانیاً طیف ناهمسانگرد با پتانسیل مثلث گسترش یافته است . در [۵۰] نشان داده شده است که ترکیب های گوناگون از صفحه های بورن وجود دارد و همچنین اثر بررسی نشده بسیاری باقی مانده است که می توان آنها را محاسبه کرد.

۲- بررسی ترابرد دره ای در صفحات بورفین: 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 [۵۲]- [۵۳] شناخته 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 (AlAs)، 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 اتصال های سیلیکون/عایق [۵۵؛ ۵۶].

در این مواد ۲ بعدی شش ضلعی، مانند گرافن و تک لایه گروه VI که فلزی را ساندویچ کرده است. (TMD ها) (به عنوان مثال WS₂، MoSe₂، WS₂ و WSe₂)، ویژگی های الکترونیکی لبه باند تحت سلطه دو دره ناموزون هستند که در نقاط +K و -K در لبه های منطقه بریلوئن قرار دارند. (شکل ۴). این دره ها را می توان با یک شبه اسپین دودویی نشان داد که مانند سیستم spin-1/2 رفتار می کند. الکترونهای موجود در +K می توانند به عنوان شبه ذره اسپین بالا، و الکترونهای موجود در دره -K می توانند به عنوان در اسپین پایین برچسب گذاری شوند. بنابراین، در یک سیستم دوپینگ، یک توزیع جمعیت حامل قطبی در یک دره +K یا 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 اینصورت نمودار 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 می شود. (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 برهمکنش های 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 قدرتمند ، روش تطبیق حالت (MMT) است که با استفاده از آن حالت های 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 بخش های 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 ابر شبکه بر روی خواص ترابرد ترکیبات دو بعدی از روش ماتریس انتقال استفاده خواهیم کرد در زیر به مرور نحوه کاربرد این مدل برای توصیف سیستم های ساده تر مثل گرافین تک لایه تحت تأثیر پتانسیل پله ای دوره ای به نحوی که در شکل ۱ مشخص گردید، می پردازیم.

قسمت بالایی شکل طیف انرژی شبه ذرات را در طول گرافین تک لایه نشان می دهد. 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

$$V(x) = \begin{cases} V. & l_{(2i-1)} < |x| < l_{2i} \quad i=1,2,\dots \\ 0. & \text{Otherwise} \end{cases}$$

این شکل پتانسیل مشابه همان شکلی است که در ابر شبکه های مبتنی بر نیم رسانا های معمولی اتفاق می افتد. تفاوت اساسی سیستم ما در این خواهد بود که رفتار حامل های بار به جای معادله شرودینگر از معادله دیراک تبعیت می کند که همیلتونی آن را می توان به شکل زیر نوشت

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

که در آن $v_f = 10^6$ m/s سرعت فرمی و $\sigma(\sigma_x, \sigma_y)$ ماتریس های پائولی هستند. الکترون ها و حفره ها در نیم رسانا ها معمولاً توسط دو معادله شرودینگر جداگانه که با یکدیگر ارتباطی ندارند توصیف می شوند. اما در سیستم های دو بعدی نظیر این سیستم الکترون ها 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 حاصل ضرب ماتریس های انتقال ماتریس انتقال ابر شبکه به صورت زیر حاصل می شود:

$$S(z) = S(z = l_1) = S(z = l_2) = \dots S(z = l_i) \dots S(z = l_{n-1})$$

$$S(z = l_i) = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix} \quad (1-3)$$

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

$$T(\phi) = \frac{e^{-2ik_x L D - q(D+L)(1+e^{2i\theta})^2(1+e^{2i\phi})^2}}{A_1^2 + B_1^2} \quad (2-3)$$

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

$$G = G_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(E, \sqrt{2}E \sin \phi) \cos \phi d\phi \quad (3-3)$$

که در آن $G_0 = e^2 m v_F w / \hbar$ خواهد بود.

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 $H_{,,}$ را محاسبه و همچنین برهمکنش یک سوپرسل با سلول مجاورش $H_{,,1}$ 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.

$$g_{,,}^L = [E^+ I - H_{,,} - H_{-,,}^\dagger]^{-1} \quad (4-3)$$

$$g_{M+1,M+1}^R = [E^+ I - H_{,,} - H_{-,,}^\dagger]^{-1}$$

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

$$\Lambda = t_{,,} + \hat{t}_{,,} t_{1,,} + \hat{t}_{,,} \hat{t}_{1,,} t_{2,,} + \dots \hat{t}_{,,} \hat{t}_{1,,} \hat{t}_{2,,} \dots t_n \quad (5-3)$$

$$\hat{\Lambda} = \hat{t}_{,,} + t_{,,} \hat{t}_{1,,} + \hat{t}_{,,} \hat{t}_{1,,} t_{2,,} + \dots t_{,,} t_{1,,} t_{2,,} \dots \hat{t}_n$$

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

$$t_i = (I - t_{i-1} \hat{t}_{i-1} - \hat{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^\dagger \quad (6-3)$$

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

و به ازای مقدار $i = 0$ داریم:

$$\begin{aligned} t_{\cdot} &= (E^+ I - H_{\cdot,\cdot})^{-1} H_{-\cdot,\cdot}^\dagger \\ t_{\cdot} &= (E^+ I - H_{\cdot,\cdot})^{-1} H_{-\cdot,\cdot} \end{aligned} \quad (7-3)$$

با در نظر گرفتن سوپرسل نمونه به عنوان قسمتی از لید چپ به صورت لایه به لایه (از $l = M$ تا $l = 2$) می‌توانیم تابع گرین سطحی را بدست آوریم:

$$g_{l,l}^R = \left[E^+ I - H_{l,l} - H_{l,l} g_{l+1,l+1}^R H_{l,l+1}^\dagger \right]^{-1} \quad (8-3)$$

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

$$G_{\cdot\cdot} = [E^+ I - H_{\cdot\cdot} - \Sigma^L - \Sigma^R] \quad (9-3)$$

که در آن:

$$\begin{aligned} \Sigma^L &= H_{\cdot,\cdot}^\dagger g_{\cdot,\cdot}^L H_{\cdot,\cdot} \\ \Sigma^R &= H_{\cdot,\cdot} g_{\cdot,\cdot}^R H_{\cdot,\cdot}^\dagger \end{aligned} \quad (10-3)$$

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

$$n_j = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{(j,j)}] \quad (11-3)$$

که اندیس j, j به سایت مورد نظر اشاره می‌کند. در نهایت با استفاده از فرمول لانداور می‌تواند رسانش را بدست آورد:

$$G_{(E)} = \frac{2e^2}{h} T_{(E)} \quad (12-3)$$

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

$$\begin{aligned} T_{(E)} &= Tr[\Gamma^L G_{\setminus, \setminus} \Gamma^R G_{\setminus, \setminus}^\dagger] \\ \Gamma^{L,R} &= i[\Sigma^{L,R} - (\Sigma^{L,R})^\dagger] \end{aligned} \quad (۱۳-۳)$$

به این ترتیب هزینه محاسباتی این سیستم $2Nx2N$ به طور خطی با N تغییر می‌کند. این روش را به راحتی می‌توان 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

فصل ۵

جمع‌بندی و پیشنهادها

کتاب نامه

- [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. Gjeltrema, 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.

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

Probabilistic	احتمالی
Measure	اندازه
Heuristic	هیوریستیک
Topology	توپولوژی
Cut	برش
Experiment	آزمایش
Social Networks	شبکه‌های اجتماعی
Program Fragment	قطعه برنامه
Data Mining	داده کاوی
Graph	گراف
Edge	یال
Node	گره
Centrality	مرکزیت
Global	جهانی
Local	محلی
Lovain	لوون
Unstable	ناپایدار
Weblog	وبلاگ
Post	پست
Partition	افراز
Cluster	خوشه
Overlapping	همپوشان
Bridge	پل
Partition	افراز
CLuster	خوشه

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی

Component	مولفه
Community	اجتماع
Complex Networks	شبکه‌های پیچیده
Power-Law Distribution	توزیع توانی
Small-World Phenomenon	پدیده‌ی دنیای کوچک
Probabilistic	احتمالی
Random	تصادفی
Benchmark	محک
Bar-Chart	نمودار میله‌ای
Seed Selection	انتخاب دانه
Expansion	بسط
Social System	سیستم اجتماعی
Real-World	دنیای واقعی
Seed Node	گره دانه
Expansion	بسط
Boundary	پیرامون
Performance	کارایی
Articulation-Point	گره برشی
Cut-Node	گره برشی
Cut-Edge	یال برشی
Expert	متخصص
Cohesiveness	انسجام
Separability	جدایی پذیری

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