

# Spin-orbit coupling and Berry's curvature effects on optical valley polarization in NbX<sub>2</sub> monolayers = Efek spin-orbit coupling dan Berry's curvature terhadap polarisasi valley optik dalam monolayer NbX<sub>2</sub>

Muhammad Ja'far Prakoso, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20523249&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Valley elektronik adalah nilai energi ekstrem dalam struktur pita suatu material, yang dalam kondisi tertentu dapat memberikan derajat kebebasan baru selain muatan dan spin. Dalam hal ini, bidang penelitian yang disebut valleytronics berfokus pada manipulasi dan pemanfaatan valley untuk aplikasi potensial dalam teknologi informasi dan perangkat elektronik. Dari banyak pilihan material, semikonduktor dua dimensi (2D) berjenis logam transisi dichalcogenides (TMDs) muncul sebagai kelas material yang potensial untuk valleytronics karena ketersediaan celah pita yang cukup besar pada dua posisi vektor gelombang yang tidak ekuivalen yang memiliki kerusakan simetri pembalikan waktu sekaligus inversi. Dalam penelitian ini, kami menyelidiki polarisasi valley optik pada material monolayer NbX<sub>2</sub> (X = S, Se, Te) 2D, yang juga merupakan spesies TMD, dengan menghitung elemen matriks interaksi elektron-foton untuk eksitasi elektronik yang diinduksi oleh cahaya terpolarisasi sirkular. Dari perhitungan prinsip pertama beserta efek spin-orbit coupling (SOC), kami menemukan bahwa, meskipun monolayer NbX<sub>2</sub> secara intrinsik adalah logam, elektron di valley K (atau K') dapat dieksitasi secara selektif oleh cahaya terpolarisasi sirkular kiri (atau kanan). Dengan menyesuaikan posisi level Fermi dan energi laser agar beresonansi dengan celah pita di valley K (atau K'), secara teori dimungkinkan untuk mendapatkan polarisasi valley optik yang sempurna di valley K (atau K') pada monolayer NbX<sub>2</sub>. Kami juga menemukan bahwa Berry's curvature dari NbX<sub>2</sub> adalah besaran yang berguna untuk menentukan polarisasi valley optik. Polarisasi valley optik berkorelasi dengan Berry's curvature karena adanya efek SOC di NbX<sub>2</sub>. Hasil penelitian kami memperluas kelas material opto-valleytronics, tidak hanya terbatas pada semikonduktor tetapi juga mencakup logam.

.....Electronic valleys are the energy extrema in the band structure of a material, which, under a specific condition, can give a new degree of freedom beyond the charge and spin. In this regard, a research field called "valleytronics" focuses on the manipulation and utilization of the valley degree of freedom for its potential applications in information technology and future electronic devices. Of many materials, semiconducting two-dimensional (2D) transition metal dichalcogenides (TMDs) emerged as a potential class of materials for valleytronics due to the availability of sizable band gaps at two inequivalent, time-reversal, and inversion symmetry-broken wave vectors. In this work, we investigate the optical valley polarization in 2D monolayer NbX<sub>2</sub> (X = S, Se, Te), a particular species of TMDs, by computing electron-photon interaction matrix elements for electronic excitations induced by circularly polarized light. From first-principles calculations with the spin-orbit coupling (SOC) effect, we find that, although monolayer NbX<sub>2</sub> are intrinsically metallic, the electrons at the K (or K') valleys can be excited selectively with left-handed (or right-handed) circularly polarized light. By adjusting the Fermi level position and laser energy to be resonant to band gaps at the K (or K') valleys, it is theoretically possible to obtain perfect optical valley polarization at the K (or K') valleys in monolayer NbX<sub>2</sub>. We also find that Berry's curvature of NbX<sub>2</sub> is a useful quantity to be analyzed for determining the optical valley polarization, i.e., the optical valley polarization correlates to Berry's curvature due to the presence of strong SOC in NbX<sub>2</sub>. Our research results

extend the class of opto-valleytronic materials, not only limited to semiconductors but also including metals.