

**PENGARUH MEDAN LISTRIK TERHADAP SIFAT
ELEKTRONIK, MAGNETIK, DAN TERMOELEKTRIK
MATERIAL NiCl_2 MONOLAYER BERBASIS *DENSITY
FUNCTIONAL THEORY***

Skripsi

**Disusun untuk memenuhi salah satu syarat
memperoleh gelar Sarjana Sains**



**Muhammad Andrianto Abdillah
1306619027**








**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN
ALAM UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
2023**

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

PENGARUH MEDAN LISTRIK TERHADAP SIFAT ELEKTRONIK, MAGNETIK, DAN TERMOELEKTRIK MATERIAL NiCl_2 MONOLAYER BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Nama : Muhammad Andrianto Abdillah

No. Registrasi : 1306619027

	Nama	Tanda Tangan	Tanggal
Penanggung Jawab			
Dekan	: Prof. Dr. Muktiningsih N., M.Si NIP. 19640511 198903 2 001		24-08-2023
Wakil Penanggung Jawab			
Wakil Dekan I	: Dr. Esmar Budi, M.T. NIP. 19720728 199903 1 002		24-08-2023
Ketua	: Dr. Widyaningrum Indrasari, M.Si NIP. 19770510 200604 2 001		23-08-2023
Sekretaris	: Haris Suhendar, M.Sc NIP. 19940428 202203 1 0006		18-08-2023
Anggota			
Pembimbing I	: Dr. Teguh Budi Prayitno, M. Si. NIP. 19820526 200812 1 001		21-08-2023
Pembimbing II	: Dr. Edi Suprayoga NIP. 19880408 201902 1 003		15-08-2023
Penguji	: Dr. Iwan Sugihartono, M.Si NIP. 19791010 200801 1 018		14-08-2023

Dinyatakan lulus ujian skripsi tanggal 2 Agustus 2023

LEMBAR PERNYATAAN

Saya menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi dengan judul **“Pengaruh Medan Listrik Terhadap Sifat Listrik, Magnetik, & Termoelektrik Material NiCl₂ Monolayer Berbasis *Density Functional Theory*”** yang disusun sebagai syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains dari Program Studi Fisika Universitas Negeri Jakarta adalah karya ilmiah saya dengan arahan dosen pembimbing.

Sumber informasi yang diperoleh dari penulis lain yang telah dipublikasikan yang disebutkan dalam teks skripsi ini, telah dicantumkan dalam Daftar Pustaka sesuai dengan norma, kaidah dan etika penulisan ilmiah.

Jika kemudian hari ditemukan sebagian besar skripsi ini bukan hasil karya saya sendiri dalam bagian-bagian tertentu, saya bersedia menerima sanksi pencabutan gelar akademik yang saya sanding dan sanksi-sanksi lainnya sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Jakarta, 16 Agustus 2023



Muhammad Andrianto Abdillah



KEMENTERIAN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
UPT PERPUSTAKAAN

Jalan Rawamangun Muka Jakarta 13220
Telepon/Faksimili: 021-4894221
Laman: lib.unj.ac.id

LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI
KARYA ILMIAH UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas akademika Universitas Negeri Jakarta, yang bertanda tangan di bawah ini, saya:

Nama : Muhammad Andrianto Abdillah
NIM : 1306619027
Fakultas/Prodi : FMIPA / FISIKA
Alamat email : muhammadandrianto091@gmail.com

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada UPT Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif atas karya ilmiah:

Skripsi Tesis Disertasi Lain-lain (.....)

yang berjudul :

Pengaruh Medan Listrik Terhadap Sifat Elektronik, Magnetik, Dan Termoelektrik
Material NiCl₂ Monolayer Berbasis Density Functional Theory

Dengan Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif ini UPT Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta berhak menyimpan, mengalihmediakan, mengelolanya dalam bentuk pangkalan data (*database*), mendistribusikannya, dan menampilkan/mempublikasikannya di internet atau media lain secara *fulltext* untuk kepentingan akademis tanpa perlu meminta ijin dari saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan atau penerbit yang bersangkutan.

Saya bersedia untuk menanggung secara pribadi, tanpa melibatkan pihak Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, segala bentuk tuntutan hukum yang timbul atas pelanggaran Hak Cipta dalam karya ilmiah saya ini.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Jakarta, 28 Agustus 2023.

Penulis

(M. Andrianto A)
nama dan tanda tangan

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur kehadiran Allah SWT yang telah memberikan kemudahan, rahmat dan hidayahnya sehingga tugas skripsi ini dapat diselesaikan oleh penulis. Penelitian ini telah disusun dan direncanakan sejak bulan Agustus 2022 dengan judul “Pengaruh Medan Listrik Sifat Listrik, Magnetik, & Termoelektrik Material NiCl_2 Monolayer Berbasis *Density Functional Theory*”.

Selanjutnya, penulis dengan segala hormat dan rasa bangga ingin menyampaikan ucapan terima kasih kepada seluruh pihak yang secara langsung ataupun tidak langsung membantu penyusunan skripsi ini, berikut pihak-pihak yang bisa saya sebutkan:

1. Ibu Dr. Widyaningrum Indrasari, M.Si. selaku Koordinator Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta yang telah membimbing, memberi semangat, dan sabar dalam mendukung perjalanan penulis selama berkuliah.
2. Bapak Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si. selaku Pembimbing I dan Bapak Dr. Edi Suprayoga selaku Pembimbing II atas kesediaan dan meluangkan waktunya.
3. Seluruh dosen Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta.
4. Orang tua terkhusus ibu sholaetun yang telah mendoakan anak pertamanya selalu yang merantau ke Jakarta dan segenap saudara yang telah turut andil besar dalam langkah rian meraih gelar sarjana. Dikhususkan juga kepada Tante Nilma dan keluarga yang ada di Cikarang yang telah memberikan tempat singgah selama rian merantau.
5. Bagus Nuryasin S.Si, dan Raygha Shihab Putra yang telah menemani, memberikan semangat, bantuan, dan selalu mendukung penulis di masa-masa sulit.
6. Teman-teman 2019 dan seperjuangan semasa kuliah penulis di UNJ, yang telah menemani perjuangan belajar bersama selama 4 tahun. Semoga kelak kita bisa selalu menjalin hubungan yang baik satu sama lain.

Penulis mengakui bahwa penulisan skripsi ini masih terdapat kekurangan dalam pengetahuan dan pengalaman. Maka penulis berharap untuk mendapatkan kritik dan saran yang konstruktif guna meningkatkan kualitas penulisan di masa yang akan datang.

Jakarta, 30 Juli 2023



Muhammad Andrianto A



ABSTRAK

MUHAMMAD ANDRIANTO ABDILLAH. Pengaruh Medan Listrik Terhadap Sifat Elektronik, Magnetik, dan Termoelektrik Material NiCl_2 *Monolayer* Berbasis *Density Functional Theory*. Dibawah Bimbingan TEGUH BUDI PRAYITNO, EDI SUPRAYOGA

Nikel diklorida NiCl_2 *monolayer* dengan sifatnya, baik dari segi struktur kristal, elektronik, dan magnetiknya, dianggap menjadi salah satu alternatif material yang berpotensi untuk pengembangan aplikasi spintronik. Medan listrik eksternal yang diterapkan pada material dengan tujuan dapat mengontrol sifat listrik dan magnet merupakan hal yang sangat penting dalam aplikasi perangkat spintronik. Pada penelitian ini, telah dilakukan perhitungan non-kolinier menggunakan teori fungsi kerapatan (DFT) untuk menganalisa pengaruh interaksi spin-orbit dan medan listrik eksternal yang diberikan pada NiCl_2 *monolayer*. Perhitungan tersebut menunjukkan bahwa interaksi spin-orbit dan penerapan variasi medan listrik eksternal menyebabkan terjadinya pengurangan celah pita energi di titik perubahan sifat listrik NiCl_2 *monolayer* dari semikonduktor tidak langsung ke logam dan menghilangkan sifat magnetik atom pusatnya. Temuan kami menunjukkan bahwa interaksi dan medan listrik eksternal untuk pengembangan perangkat spintronik berperan penting dalam mengontrol sifat material NiCl_2 *monolayer*.

Kata Kunci: NiCl_2 *monolayer*, *Density Functional Theory*, *Spin-Orbit Coupling*, medan listrik eksternal, spintronik.

ABSTRACT

MUHAMMAD ANDRIANTO ABDILLAH. The Influence of Electric Field on the Electronic, Magnetic, and Thermoelectric Properties of NiCl₂ Monolayer Materials Based on Density Functional Theory. Under the Supervised by TEGUH BUDI PRAYITNO, EDI SUPRAYOGA.

The potential use of nickel dichloride (NiCl₂) monolayer, with its unique characteristics in terms of crystal structure, electronics, and magnetism, has been identified in the field of spintronics. The manipulation of its electrical and magnetic properties through the application of an external electric field is vital for the development of spintronic devices. In this research, non-collinear calculations employing density functional theory (DFT) were conducted to examine the impact of spin-orbit interaction and external electric fields on the NiCl₂ monolayer. The calculations revealed that the interaction between spin and orbit, as well as the varying external electric fields, resulted in a decrease in the energy gap at the Γ point, a transformation of NiCl₂ monolayer's electrical characteristics from an indirect semiconductor to a metal, and the elimination of magnetic properties associated with its central atom. These findings emphasize the significant role played by the interaction and external electric fields in controlling the properties of NiCl₂ monolayer for the advancement of spintronic devices.

Keywords: *NiCl₂ monolayer, Density Functional Theory, Spin-Orbit Coupling, external electric field, spintronics.*

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI.....	i
LEMBAR PERNYATAAN.....	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
ABSTRAK.....	v
ABSTRACT.....	vi
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR TABEL.....	ix
DAFTAR GAMBAR.....	x
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang.....	1
B. Rumusan Masalah.....	6
C. Tujuan Penelitian.....	6
D. Manfaat Penelitian.....	6
BAB II KAJIAN PUSTAKA.....	8
A. Spin-Orbit Coupling (SOC).....	8
B. Struktur Elektronik berdasarkan <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	10
1. Masalah Sistem Kompleks di Materi Terkondensasi.....	11
2. Pendekatan Hartree.....	12
3. Pendekatan Hartree-Fock.....	13
4. Pendekatan <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	14
C. Material NiCl ₂ <i>Monolayer</i>	29
1. Struktur Kristal.....	29
2. Struktur Elektronik.....	32
3. Struktur Magnetik.....	32
D. Termoelektrik.....	34
E. Semikonduktor.....	37
F. Konduktivitas.....	38
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	42
A. Tempat dan Waktu Penelitian.....	42

1. Tempat Penelitian.....	42
2. Waktu Penelitian	42
B. Metode Penelitian.....	43
1. Alat Penelitian	43
2. Prosedur Penelitian.....	44
3. Diagram Alir Penelitian.....	46
C. Teknik Pengumpulan dan Analisis Data	47
1. Teknik Pengumpulan Data Penelitian	47
2. Teknik Analisis Data Penelitian	47
3. Hasil Penelitian Awal.....	47
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	49
A. Distribusi Elektron Keadaan Dasar	49
B. Hasil Pengoptimalan Geometri Struktur Kristal.....	50
C. Hasil Perhitungan Struktur Elektronik	52
D. Hasil Perhitungan Koefisien Seebeck	60
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	63
A. Kesimpulan.....	63
B. Saran.....	64
DAFTAR PUSTAKA	65
LAMPIRAN.....	69
DAFTAR RIWAYAT HIDUP.....	70

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1. Parameter struktur kristal dan sifat magnetik NiCl_2 <i>monolayer</i> : panjang kisi eksperimen ($a = b$, Å), panjang kisi teoritis ($a = b$, Å), panjang ikatan Ni–Cl($d_{\text{Ni-Cl}}$, Å), suhu Curie Transisi FM \leftrightarrow AFM (T_C , K), sifat magnet pada keadaan dasar (MS), dan momen magnetik rata-rata per atom M (m , μ_B). [1] (Kulish & Huang, 2017) , [2] (Botana & Norman, 2019) , [3] (Mcguire, 2017), [4] (Lu, dkk., 2019)	31
Tabel 3.1. Rincian Waktu Penelitian	42
Tabel 4.1. Panjang Ikatan Ni-Cl ($d_{\text{Ni-Cl}}$, Å) dan sudut ikatan. Ni-Cl-Ni ($\theta_{\text{Cl} - \text{Ni} - \text{Cl}}$, °). [1] (Kulish & Huang, 2017) , [2] (Mushtaq, dkk., 2017), [3] (Lu, dkk., 2019).....	50
Tabel 4.2. Celah pita energi (E_g , eV) dan momen magnetik atom Ni (m_{Ni} , μ_B). [1] (Kulish & Huang, 2017), [2] (Mushtaq, dkk., 2017), [3] (Lu, dkk., 2019)	53

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1. Diagram macam macam implementasi melalui Spin-Orbit Copling (Manchon dkk., 2015)	2
Gambar 2.1. Visualisasi gerak relativistic (Chapman, 2011).....	8
Gambar 2.2. Band degenerasi material (a) tanpa adanya efek SOC dan (b) SOC terhadap E (Energi) dan K (Bilangan Kuantum). (Elliot, 1954).....	9
Gambar 2.3. Ilustrasi metode Density Functional Theory (DFT) dalam sistem banyak benda. (Lusk, dkk, 2011)	14
Gambar 2.4. Diagram Alir Self-consistent persamaan Kohn-Sham	19
Gambar 2.5. Struktur Kristal logam transisi dihalida (MX_2) dalam konfigurasi struktur T: (a) bulk dan (b dan c) monolayer. Tampilan atas (b) dan samping (c). (Kulish & Huang, 2017)	30
Gambar 2.6. Struktur Geometri dari $NiCl_2$ monolayer	31
Gambar 2.7. Konfigurasi elektron atom nikel.....	32
Gambar 2.8. Ilustrasi mekanisme interaksi langsung (M-M) dan superexchange (M-X-M). (Kulish & Huang, 2017).....	33
Gambar 2.9. Interaksi superexchange M-X-M untuk sudut ikatan 90° M-X-M. (Kulish & Huang, 2017).	33
Gambar 2.10. Komposisi susunan semikonduktro pada termoelektrik (Puspita, 2017).....	34
Gambar 2.11. Eksperimen efek Seebeck (Goldsmid, 2016).....	36
Gambar 2.12. Prinsip kerja generator termoelektrik (Anwar, 2014)	37
Gambar 2.13. Perbedaan energi <i>band gap</i> pada material (Aminullah, 2019).....	38
Gambar 3.1. Struktur $NiCl_2$ monolayer. Tampilan atas (a) dan samping (b). (Perak : Ni dan Hijau : Cl)	45
Gambar 3.2. Diagram Alir Penelitian	46
Gambar 3.3. Struktur pita energi material $NiCl_2$ monolayer yang dihitung (a) tanpa efek SOC dan (b) dengan efek SOC`	47

Gambar 4.1 Orbital Spin Struktur pita elektronik dari NiCl ₂ monolayer untuk atom (a) Ni dan (b) Cl. Jari-jari lingkaran yang ditunjukkan merupakan representasi dari besarnya distribusi spin orbital disepanjang pita energi	49
Gambar 4.2. Jarak atom Cl terhadap bidang atom Ni pada arah sumbu z, panjang ikatan, dan sudut ikatan antar atom pada NiCl ₂ monolayer (atas) dan grafik jarak atom Cl pada arah sumbu z terhadap perubahan medan listrik eksternal (bawah)	51
Gambar 4.3 Struktur Pita Energi Material NiCl ₂ monolayer (a) tanpa dan (b) dengan efek <i>Spin-Orbit Coupling</i>	52
Gambar 4.4. Struktur pita energi NiCl ₂ monolayer dengan pemberian medan listrik eksternal 0, 5, 10, 15, 20, 25, dan 30 V/nm, dari (a) sampai (n) merupakan hasil struktur elektronik tanpa dan dengan efek SOC, masing-masing kanan dan kiri.....	56
Gambar 4.5. Grafik perubahan celah pita energi NiCl ₂ monolayer terhadap pemberian medan listrik eksternal	57
Gambar 4.6. Pemisahan pita di (a) pita energi dengan pemberian medan listrik eksternal sebesar 20 V/nm dan efek SOC, yang diperjelas melalui (b) pita konduksi dan (c) pita valensi-nya di sepanjang titik Γ dan K pada material NiCl ₂	58
Gambar 4.7. Grafik momen magnetik total atom Ni terhadap variasi pemberian medan listrik eksternal.....	59
Gambar 4.8. Koefisien Seebeck material NiCl ₂ monolayer pada saat pemberian medan listrik sebesar (a) 0, (b) 5, (c) 10, (d) 15, (e) 20, (f) 25, dan (g) 30 V/nm	61
Gambar 4.9. Grafik Penurunan Koefisien Seebeck material NiCl ₂ monolayer	62