

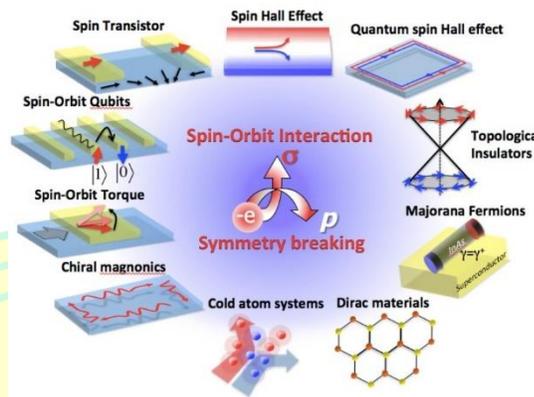
# BAB I

## PENDAHULUAN

### A. Latar Belakang

Bidang Sains dan Teknologi informasi mengalami revolusi besar-besaran terhadap pengembangan perangkat pemrosesan informasi secara komputasi. Penggunaan spin elektron daripada muatan elektron untuk memproses, mentransfer, dan mengontrol sinyal dinilai lebih cepat dan efektif dalam merepresentasikan gerbang logika (Shaogang, dkk, 2006). Hal ini juga akan meningkatkan kecepatan pemrosesan data dan efisiensi energi. Setiap elektron yang bergerak karena pengaruh medan magnet eksternal akan menimbulkan polarisasi spin yang berlawanan arah terhadap arah medan magnet eksternal tersebut. Polarisasi spin tersebut memiliki 2 kemungkinan arah yaitu *spin up* dan *spin down*. *Spin up* dan *spin down* ini akan menggambarkan gerbang logika keadaan "1" dan "0" berturut-turut, fenomena inilah yang mendasari perangkat berbasis spintronik (Khaerabadi, dkk, 2014). Oleh karena itu, pengembangan dan penelitian tentang perangkat berbasis spintronik ini semakin menjadi daya tarik ilmuwan (Hirohata & Takanashi, 2014).

Pengembangan perangkat spintronik secara garis besar merupakan pengembangan studi sifat fisik spin elektron pada zat padat seperti pembangkitan, manipulasi, dan deteksi spin. Efek *Spin-Orbit Coupling* (SOC) dapat dimanfaatkan untuk melakukan pembangkitan, manipulasi, dan deteksi spin. (C. M. Marian, 2001). Pada material zat padat, SOC didasari dari kecepatan elektron pada sebuah medan listrik intrinsik kristal, yang efeknya akan berbeda tergantung karakteristik material (Galitski & Spielman, 2013).



Gambar 1.1. Diagram macam macam implementasi melalui Spin-Orbit Copleing (Manchon dkk., 2015)

Banyak efek yang disebabkan oleh adanya SOC. Menurut Machon dan rekan penelitiannya, SOC memiliki macam-macam implementasi efek diantaranya *Spin transistor*, *spin hall effect*, *spin-orbit qubits*, *spin-orbit torque*, *chiral magnonics*, *cold atom system*, *dirac material*, *majorana fermions*, *topological insulators*, *quantum spin hall effect*. Variasi efek SOC inilah yang memunculkan bidang spin-orbitronika atau seni memanipulasi spin menggunakan SOC (Machon, dkk, 2015)

Dalam pengaplikasian SOC untuk perangkat spintronik, diperlukan studi secara khusus terkait sifat dan karakteristik spin pada material. Material yang sangat diminati oleh peneliti dalam pengembangan perangkat spintronik yaitu Graphene. Graphene memiliki struktur kisi hexagonal dan sangat diminati karena karakteristik dua dimensinya (2D) yang memicu fenomena materi terkondensasi yang tidak ditemukan pada sistem bulk grafit (Chhowalla, dkk, 2013). Namun, karena sifat semi-logam graphene, aplikasi spintronik modern cenderung tidak maksimal karena membutuhkan material semikonduktor (Novoselov, dkk, 2005). Pernyataan ini didukung oleh Huang & Zheng yang mengatakan bahwa graphene tidak memiliki celah pita (*band gap*) alami (Huang & Zheng, 2018). Hal ini memicu maraknya studi yang bertujuan untuk mencari alternatif yang tepat untuk pengembangan perangkat spintronik.

Suatu kelompok material yang bisa dijadikan bahan dasar untuk pengembangan spintronic yaitu kelompok logam transisi dikalkogenida dua-dimensi (2D TMDCs).

Keluarga material ini memiliki sifat semikonduktor pada tipe  $MX_2$ , dengan M (M : Mo, W) sebagai atom logam transisi dan X (X : S, Se, Te) sebagai atom kalkogen (Manzeli, dkk, 2017). Penelitian yang dilakukan oleh Affandi dan Absor menjelaskan bahwa celah pita energi dari tungsten dikalkogenida  $WX_2$  (X = S, Se) dapat berubah setelah diberikan pengaruh medan listrik eksternal (Affandi & Absor, 2018). Selain itu, Ciarrocchi dan rekan-rekannya juga mempublikasikan salah satu material dari kelompok 2D TMDCs yaitu  $MoS_2$ . Mereka mengatakan bahwa  $MoS_2$  dengan struktur bulk-nya dapat diubah dari semikonduktor celah tidak langsung ke semikonduktor celah langsung bahkan dapat berubah ke logam konduktor jika pengaruh ketebalan lingkungan  $PtSe_2$  direduksi (Ciarrochi, dkk, 2018). Tetapi, Aplikasi logam transisi dikalkogenida pada perangkat berbasis spintronik terbatas karena sebagian besar kelompok material yang bersifat non magnetik.

Pentingnya sifat magnet intrinsik pada material dua dimensi dalam proses pembangkitan dan manipulasi spin pada perangkat lunak menjadikan pencarian metode induksi sifat magnet dan material yang memiliki sifat magnet intrinsik alternatif dilakukan. Pada material non-magnetik ada beberapa cara yang telah dilakukan untuk menginduksi sifat kemagnetan seperti pemberian doping dan tegangan serta regangan. Namun, material yang dihasilkan tidak stabil dan sulit dikontrol. Logam transisi dihalida dapat menjadi pilihan kelompok material lain yang memiliki struktur Kristal dan mirip dengan logam transisi dikalkogenida, bersifat semikonduktor dan mempunyai struktur magnet, pernyataan ini disampaikan oleh Kulish di studinya (Kulish, Huang, 2017). Penelitian ini didukung oleh pernyataan Kovaleva pada studinya yang mengatakan pada logam transisi dihalida ( $TMHal_2$ ) mempunyai potensi sebagai alternatif pengganti logam transisi dikalkogenida meskipun potensinya akan maksimal jika kita tinjau dalam bentuk *monolayer* atau tidak pada struktur *bulk*-nya (Kovaleva, 2019).

Menurut Prayitno (Prayitno, 2021) pada penelitiannya, Logam transisi dihalida sendiri merupakan material berlapis yang mempunyai interaksi *van der Waals* (vdW) yang lemah antar *layer*. Dalam sistem dua dimensi, struktur magnetik pada material ini mengabaikan teorema Mermin-Wagnet yang melarang *magnetism* karena penekanan

kuat dari fluktuasi termal. Penyebab hal ini terjadi karena material *van der Waals* menghasilkan anisotropik magnetik untuk menjaga *long-range magnetic order* yang mengatasi fluktuasi termal, sehingga mengacu pada feromagnetik intrinsik. Struktur helimagnetik dibentuk oleh beberapa logam di kelompok ini pada struktur bulknya sekaligus menampilkan sifat multiferroik yang dihasilkan oleh kombinasi sifat feromagnetisme dan feroelektrisitas yang muncul di fase yang sama. Hal ini lah yang sangat berguna bagi aplikasi spintronic (Kurumaji dkk, 2013). NiCl<sub>2</sub> merupakan salah satu material dalam kelompok logam transisi dihalida *monolayer* yang berpotensi memiliki sifat multiferroik dari struktur *bulk*-nya (Tokunaga dkk, 2011). Dengan beberapa potensi ini, produksi dan aplikasi logam dihalida dapat diterapkan dalam waktu dekat dengan metode sintesis material dua dimensi seperti teknik pengelupasan (Kulish & Huang, 2017)

Berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh Kulish & Huang tentang stabilitas dan sifat magnet dari material NiCl<sub>2</sub> *monolayer* menggunakan perhitungan *Density Functional Theory* (DFT) yang diterapkan dengan perangkat lunak *Quantum Espresso* menunjukkan bahwa material NiCl<sub>2</sub> *monolayer* pada keadaan dasar memiliki struktur kristal T yang secara geometri mirip dengan logam transisi dikalkogenida dan memiliki fleksibilitas tinggi karena ikatan ionik. Material NiCl<sub>2</sub> *monolayer* memiliki sifat semikonduktor dengan momen magnet sebesar  $2 \mu_B$ . Material NiCl<sub>2</sub> *monolayer* bersifat feromagnetik pada keadaan dasar dan memiliki suhu Curie sebesar 138 K serta memiliki energi *exchange* per atom Ni sebesar 38,55 meV ( $E_{ex} = E(\text{AFM}) - E(\text{FM})$ ).

Botana & Norman pernah melakukan penelitian mengenai struktur elektronik dan magnet material NiX<sub>2</sub> (X: Cl, Br, I) dari struktur *bulk* hingga struktur *monolayer* menggunakan perhitungan *Density Functional Theory* (DFT). Mereka menerapkan proses komputasi material menggunakan perangkat lunak WIEN2k. Hasil penelitian tersebut menunjukkan struktur *bulk* NiCl<sub>2</sub> memiliki konfigurasi magnetik dengan momen dalam bidang yang selaras secara feromagnetik dalam setiap lapisan, dengan susunan antiferromagnetik. Struktur NiCl<sub>2</sub> *monolayer* bersifat semikonduktor yang mempunyai struktur magnet feromagnetik (Botana & Norman, 2019).

Berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh Lu dan rekan penelitiannya, tentang sifat mekanik, elektronik, dan magnetik material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* dan *bilayer* menggunakan perhitungan *Density Functional Theory* (DFT) yang diterapkan melalui perangkat lunak *Vienna Ab initio Simulation Package* (VASP) menunjukkan bahwa material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* merupakan material semikonduktor yang bersifat feromagnetik pada keadaan dasar dengan *band gap* sebesar 2,6 eV tanpa efek SOC dan 2,57 eV dengan efek SOC serta memiliki suhu Curie sebesar ~120 K. Energi *exfoliation* struktur *bulk*  $\text{NiCl}_2$  lebih kecil dari grafit, yaitu sebesar 0,223 J/m<sup>2</sup> dan jarak antar-lapisan lapisan *van der Waals* struktur *bulk*-nya  $\text{NiCl}_2$  sebesar 3,35 Å, yang menunjukkan teknik *exfoliation* dapat digunakan serta memiliki *in-plane stiffness* yang kuat sebesar 54 N/m sehingga dapat mempertahankan strukturnya (Lu M., dkk, 2019).

Metode *Density Functional Theory* (DFT) juga diterapkan oleh Yusuf Affandi dan rekan-rekannya, untuk mengamati pengaruh medan listrik terhadap struktur pita energi material dua dimensi. Material yang dimaksud adalah material Tungsten dikalkogenida  $\text{WX}_2$  ( $X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) *monolayer* menggunakan perangkat lunak OpenMX dengan pendekatan fungsi Energi *Exchange-Correlation Generalized Gradient Approximation* (GGA) (Affandi dkk, 2019). Hasil penelitiannya menunjukkan bahwa Tungsten dikalkogenida  $\text{WX}_2$  ( $X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) *monolayer* bersifat semikonduktor celah pita langsung (*direct semiconductor*) dengan energi *band gap* sebesar 1.53 eV dan 1 eV untuk  $\text{WS}_2$  dan  $\text{WSe}_2$ . Ketika efek SOC diberikan, struktur struktur pita energi menunjukkan pemisahan pita energi pada pita valensi maksimum dan pita konduksi minimum. Pemberian medan listrik eksternal pada Tungsten dikalkogenida  $\text{WX}_2$  *monolayer* menunjukkan adanya transisi sifat listrik dari semikonduktor celah pita langsung (*direct semiconductor*) ke semikonduktor celah pita tidak langsung (*indirect semiconductor*) ke logam (*metallic*) dan pergeseran pita valensi maksimum dan pita konduksi minimum ketika pemberian medan listrik meningkat.

Berdasarkan latar belakang tersebut, maka akan dilakukan penelitian pengaruh medan listrik terhadap sifat listrik dan magnetik material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* berbasis *Density Functional Theory* (DFT). Perhitungan struktur elektronik berbasis *Density Functional Theory* (DFT) dengan fungsi *Energy Exchange-Correlation Generalized*

*Gradient Approximation* (GGA) dan perhitungan *spin textures* yang diimplementasikan dengan OpenMX akan menjadi dasar metode pada penelitian ini (Ozaki dkk, 2008). Dengan studi ini diharapkan memberikan pemahaman mengenai efek SOC dan pengaruh medan listrik terhadap sifat listrik dan magnetik dalam material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* yang memiliki aplikasi yang menjanjikan dalam perangkat spintronik pada kelompok logam transisi halida, sehingga memperluas jangkauan material dua dimensi untuk aplikasi spintronik di masa depan.

#### **B. Rumusan Masalah**

Berdasarkan latar belakang yang dijelaskan sebelumnya, maka rumusan masalah penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Bagaimana struktur elektronik dan magnetik pada material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* tanpa efek *Spin-Orbit Coupling* dan dengan efek *Spin-Orbit Coupling* ?
2. Bagaimana pengaruh medan listrik terhadap struktur elektronik dan magnetik pada material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* ?
3. Bagaimana Pengaruh medan listrik terhadap sifat Termoelektrik material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer*?

#### **C. Tujuan Penelitian**

Tujuan penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Menganalisis struktur elektronik dan magnetik material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* berbasis *Density Functional Theory* (DFT)
2. Mengevaluasi pengaruh medan listrik terhadap struktur elektronik dan magnetik material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer*
3. Menganalisis sifat Termoelektrik  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* terhadap pengaruh medan listrik eksternal

#### **D. Manfaat Penelitian**

Berdasarkan tujuan yang ingin dicapai, manfaat penelitian ini adalah

1. Memberikan pemahaman tentang efek *Spin-Orbit Coupling* pada material kelompok logam transisi dihalida terkhusus material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* yang memiliki aplikasi yang menjanjikan dalam perangkat spintronik.

2. Memberikan informasi tentang pengaruh medan listrik terhadap sifat listrik dan magnetik material logam transisi dihalida *monolayer* terkhusus material  $\text{NiCl}_2$  *monolayer* untuk penelitian lebih lanjut mengenai sifat listrik dan magnetik berbasis *Density Functional Theory* (DFT).
3. Memberikan informasi mengenai sifat Termoelektrik material logam transisi dihalida *monolayer* untuk penelitian lebih lanjut tentang aplikasi sifat Termoelektrik.

