

**Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Seebeck dan
Nernst Anomali pada Monolayer Nickel (III) Bromide
Menggunakan *Density Functional Theory***

Skripsi

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



**Puspa Zuhrotul Kamilah
1306621058**

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
2025**

ABSTRAK

PUSPA ZUHROTUL KAMILAH. Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Seebeck dan Nernst Anomali pada Monolayer Nickel (III) Bromide Menggunakan *Density Functional Theory*. Skripsi, Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pegetahuan Alam, Universitas Negeri Jakarta. Juli 2025. Dibawah bimbingan TEGUH BUDI PRAYITNO dan EDI SUPRAYOGA.

Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis pengaruh medan listrik eksternal terhadap respons termoelektrik monolayer NiBr_3 , khususnya melalui efek Seebeck dan efek Nernst anomali, dengan menggunakan pendekatan *Density Functional Theory* (DFT). Simulasi dilakukan dengan mempertimbangkan interaksi *spin-orbit coupling* (SOC) serta variasi intensitas medan listrik yang diterapkan sepanjang sumbu-z dalam kisaran $0 - 30 \text{ V/nm}$. Hasil menunjukkan bahwa karakter metalik NiBr_3 tetap stabil, dengan perubahan lokal pada struktur pita dan momen magnetik. Medan listrik dan SOC menyebabkan penyempitan celah pita ($< 0.01 \text{ eV}$) tanpa pembukaan celah signifikan. Nilai koefisien Seebeck ($\pm 80 \mu\text{V/K}$) dan Nernst anomali ($\sim 10^{-4} \text{ V/K} \cdot T$) pada 100 K masih relatif rendah, menandakan bahwa medan listrik belum cukup efektif dalam meningkatkan performa termoelektrik. Dengan demikian, studi ini memberikan dasar awal bagi penelitian lanjutan melalui pendekatan alternatif seperti doping, rekayasa regangan (*strain engineering*), atau substitusi atomik untuk meningkatkan sensitivitas material terhadap pengaruh medan eksternal.

Kata kunci: *Density Functional Theory, medan listrik, efek Seebeck, efek Nernst anomali, NiBr_3 , spin-orbit coupling, termoelektrik*

ABSTRACT

PUSPA ZUHROTUL KAMILAH. The Influence of Electric Fields on the Seebeck Effect and Anomalous Nernst Effect in Monolayer Nickel (III) Bromide: A Density Functional Theory Study. Undergraduate Thesis, Department of Physics, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Jakarta State University. July 2025. Supervised by TEGUH BUDI PRAYITNO and EDI SUPRAYOGA.

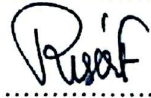
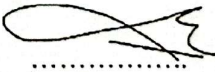
This study investigates the impact of external electric fields on the thermoelectric response of monolayer NiBr_3 , focusing on the Seebeck and anomalous Nernst effects, through Density Functional Theory (DFT) simulations. The calculations incorporate spin-orbit coupling (SOC) effects and explore electric field intensities along the out-of-plane (z-axis) direction ranging from 0 to 30 V/nm. Results indicate that NiBr_3 retains its metallic or semimetallic character, with only localized modifications observed in its electronic band structure and magnetic moments. While the electric field and SOC interactions induce slight bandgap narrowing ($< 0.01 \text{ eV}$) and minor distortions in the crystal structure, no significant bandgap opening is found. The Seebeck coefficient ($\pm 80 \mu\text{V/K}$) and anomalous Nernst signal ($\sim 10^{-4} \text{ V/K} \cdot T$) at 100 K remain relatively modest, suggesting that the applied electric field within the tested range is insufficient to enhance thermoelectric performance significantly. These findings offer a foundational understanding for further research involving alternative strategies such as doping, strain engineering, or atomic substitution to enhance the material's sensitivity to external fields.

Keywords: *Density Functional Theory, electric field, Seebeck effect, anomalous Nernst effect, NiBr_3 , spin-orbit coupling, thermoelectric*

LEMBAR PENGESAHAN

Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Seebeck dan Nernst Anomali pada Monolayer Nickel (III) Bromide Menggunakan *Density Functional Theory*

Nama : Puspa Zuhrotul Kamilah
No. Registrasi : 1306621058

	Nama	Tanda Tangan	Tanggal
Penanggung Jawab:			
Dekan	: Dr. Hadi Nasbey, M.Si. NIP. 197909162005011004		11-08-2025
Wakil Penanggung Jawab:			
Wakil Dekan I	: Dr. Meiliasari, S.Pd., M.Sc. NIP. 197905042009122002		11-08-2025
Ketua	: Riser Fahdiran, M.Si. NIP. 198307172009121008		30-07-2025
Sekretaris	: Marisa Ulfa, M.Si. NIP. 199003042024062001		30-07-2025
Anggota:			
Pembimbing I	: Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si. NIP. 198205262008121001		30-07-2025
Pembimbing II	: Dr. Edi Suprayoga NIP. 198804082019021003		31-07-2025
Penguji Ahli	: Dini Rizqi Dwi Kunti Siregar, M.Si. NIP. 199510132024062001		29-07-2025

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Dengan ini Saya Puspa Zuhroul Kamilah yang bertanda tangan dibawah ini, mahasiswa Program Studi Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Jakarta.

Menyatakan bahwa Skripsi yang saya buat dengan judul **“Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Seebeck dan Nernst Anomali pada Monolayer Nickel (III) Bromide Menggunakan *Density Functional Theory*”** adalah:

1. Dibuat, dikerjakan, dan diselesaikan oleh saya sendiri, komponen seperti data diperoleh dari hasil penelitian pada bulan Januari – Juli 2025 di Laboratorium Geofisika dan Komputasi GHA-412, Program Studi Fisika Universitas Negeri Jakarta.
2. Bukan merupakan duplikat skripsi orang lain.
3. Bukan jiplakan karya tulis orang lain.
4. Bukan terjemahan karya tulis orang lain.

Pernyataan ini saya buat semata-mata sebagai bentuk pertanggung jawaban bahwa saya siap menanggung segala resiko apabila pernyataan ini ternyata tidak benar.

Jakarta, 25 Juni 2025



Puspa Zuhrotul Kamilah



KEMENTERIAN PENDIDIKAN TINGGI, SAINS DAN TEKNOLOGI
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 : Puspa Zuhrotul Kamilah
NIM : 1306621058
Fakultas/Prodi : FMIPA/Fisika
Alamat email : puspa.zhkamilah@gmail.com

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

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

yang berjudul :

Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Seebeck dan Nernst Anomali pada Monolayer Nickel
(III) Bromide Menggunakan *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, 06 Agustus 2025

Penulis

(Puspa Zuhrotul Kamilah)

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur kehadiran Allat SWT yang telah memberikan kesempatan, suka maupun duka, rahmat dan hidayahnya sehingga saya sebagai penulis dapat menulis karya ini dengan menyelesaikannya tepat waktu. Dan tidak lupa juga, sholawat serta salam saya haturkan kepada Nabi besar Muhammad SAW. Penelitian ini telah disusun dan direncanakan sejak bulan Oktober 2024 dengan judul “Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Seebeck dan Nernst Anomali pada Monolayer Nickel (III) Bromide Menggunakan *Density Functional Theory*”.

Ada suka maupun duka yang saya rasakan saat menulis karya ini. Sebagai penulis, perkenankan saya dengan segala hormat dan rasa bangga ingin menyampaikan ucapan terima kasih kepada seluruh pihak yang secara langsung ataupun tidak langsung membantu penyusunan Skripsi ini:

1. Bapak Dr. Teguh Budi Prayitno, M. Si., selaku Koordinator Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta sekaligus Pembimbing I yang telah membimbing, memberi kesediaan meluangkan waktunya, memberi semangat dan sabar dalam mendukung perjalanan penulis selama berkuliah.
2. Bapak Dr. Edi Suprayoga selaku Pembimbing II atas kesediaan membimbing langkah demi langkah dan meluangkan waktunya, serta saran masukan lainnya.
3. Seluruh dosen Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta dan jajarannya.
4. Ayahanda dan Ibunda. Meskipun keduanya tidak sempat merasakan pendidikan tinggi hingga bangku perkuliahan, namun gigih dalam memanjatkan do'a tiada henti, mampu mendidik penulis menjadi perempuan yang tangguh, mandiri, menyelesaikan segala rintangan, hingga penulis mampu menyelesaikan studinya saat ini sampai Sarjana.
5. Sahabat dan kakak, Amanda, Aura Sasi Mei, Derice Putri N. S., Risfaiza Gunawan, Lidia Maulidina Puteri terima kasih untuk menjadi teman dan kakak bertumbuh di segala kondisi yang tidak terduga, menjadi pendengar

yang baik untuk penulis serta menjadi orang yang selalu memberikan semangat.

6. Manusia pemilik NIM 1306621011 terima kasih telah menjadi rumah, tempat berpulang dalam suka maupun duka, selalu kebersamai dan sabar selama proses. Terima kasih selalu mendahulukan kepentinganku, meluangkan waktu, tenaga, pikiran, maupun materi. Aku berdoa, semoga langkah dari kakimu selalu diperkuat, dikelilingi oleh orang-orang yang hebat, serta doa dan mimpimu satu persatu akan terjawab.
7. Teman-teman Fisika 2021 dan seperjuangan semasa kuliah penulis di UNJ terima kasih sudah berjuang bersama dan saling menguatkan. *See you on top!*
8. *Last but not least*, terima kasih untuk diri sendiri, karena telah mampu berusaha keras dan berjuang sejauh ini. Mampu mengendalikan diri dari berbagai tekanan diluar keadaan dan tak pernah memutuskan menyerah sesulit apapun prosesnya, walau terkadang harapan tidak sesuai dengan apa yang semesta berikan. *I wanna thank me for just being me at all times.*

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih mengandung kekurangan. Untuk itu, penulis memohon maaf dan sangat menghargai kritik serta saran yang membangun guna perbaikan di masa mendatang. Semoga karya ini bermanfaat bagi pembaca dan dapat dijadikan referensi dalam pengembangan ilmu. Segala kebenaran datang dari Allah SWT, sedangkan kesalahan berasal dari penulis. Semoga Allah SWT senantiasa melimpahkan rahmat dan ridho-Nya kepada kita semua.

Jakarta, 25 Juni 2025



Puspa Zuhrotul Kamilah

DAFTAR ISI

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	i
LEMBAR PENGESAHAN	ii
LEMBAR PERNYATAAN	iii
KATA PENGANTAR	iv
ABSTRAK	vi
ABSTRACT.....	vii
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	5
C. Tujuan Penelitian	5
D. Manfaat	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	7
A. <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	7
1. Dinamika Sistem Kompleks dalam Fisika Material Terkondensasi	8
2. Pendekatan Hartree	10
3. Pendekatan Hartree-Fock	11
4. Kerangka Teoretis dan Aproksimasi dalam Studi Material	12
4.1. Aproksimasi <i>Born-Oppenheimer</i>	13
4.2. Teorema <i>Hohenberg-Kohn</i>	13
4.3. Teorema Kohn-Sham	15
4.4. Fungsi Energi <i>Exchange-Correlation</i> (XC)	17
4.4.1. <i>Local Density Approximation</i> (LDA)	18
4.4.2. <i>Generalized Gradient Approximation</i> (GGA)	18
4.4.3. <i>Generalized Gradient Approximation</i> (GGA) + U	20
4.4.4. <i>Hybrid Functional</i>	20
4.5. <i>Norm-conversing pseudopotentials</i>	21

4.6. <i>Pseudo-Atomic basis Orbitals (PAO)</i>	22
4.7. <i>Non-Collinear Density Functional Theory (NC DFT)</i>	23
B. <i>Spin-Orbit Coupling (SOC)</i>	23
C. <i>Material Nickel (III) Bromide (NiBr₃) Monolayer</i>	27
1. <i>Dasar Pemilihan NiBr₃ sebagai Material Penelitian</i>	27
2. <i>Struktur Kristal</i>	28
3. <i>Struktur Elektronik</i>	30
4. <i>Struktur Magnetik</i>	31
D. <i>Termoelektrik</i>	32
1. <i>Efek Seebeck</i>	33
2. <i>Efek Nerst Anomali</i>	34
E. <i>Penelitian yang Relevan</i>	35
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	36
A. <i>Tempat dan Waktu Penelitian</i>	36
B. <i>Metode Penelitian</i>	38
1. <i>Alat dan Bahan</i>	38
2. <i>Prosedur Penelitian</i>	39
C. <i>Teknik Pengumpulan dan Analisis Data</i>	44
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	46
A. <i>Hasil Perhitungan Distribusi Elektron</i>	46
B. <i>Hasil Pengoptimalan Geometri Struktur Kristal</i>	47
C. <i>Hasil Perhitungan Struktur Elektronik dan Topologi Band</i>	49
1. <i>Struktur Elektronik pada Keadaan Dasar</i>	50
2. <i>Struktur Elektronik pada Kondisi Medan Listrik Eksternal dengan Efek SOC</i>	52
D. <i>Hasil Perhitungan Koefisien Seebeck dan Efek Nernst Anomali</i>	54
1. <i>Koefisien Seebeck</i>	54
2. <i>Efek Nernst Anomali (Anomalous Nernst Effects)</i>	56
BAB V PENUTUP.....	62
A. <i>Kesimpulan</i>	62
B. <i>Saran</i>	63
DAFTAR PUSTAKA	64

LAMPIRAN.....	73
A. Konversi Unit.....	73
DAFTAR RIWAYAT HIDUP.....	74



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1	Ilustrasi metode DFT dalam interaksi elektron yang rumit	12
Gambar 2. 2	Diagram Alir Self-consistent persamaan Kohn-Sham.....	17
Gambar 2. 3	Visualisasi gerak relativistik.....	24
Gambar 2. 4	Band degenerasi material tanpa adanya efek SOC dan tanpa SOC	26
Gambar 2. 5	(a) Struktur kristal dari monolayer NiX_3 ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{dan I}$) dengan sel satuan, yang mencakup dua atom Ni dan enam atom X. Panjang ikatan l , sudut ikatan q_1 , dan sudut aksial q_2 dilihat dari sisi samping, serta zona Brillouin heksagonal (BZ).	29
Gambar 2. 6	Prinsip Kerja Termoelektrik	32
Gambar 3. 1	Diagram Prosedur Penelitian	40
Gambar 4. 1	Orbital Spin Struktur pita elektronik dari NiBr_3 monolayer untuk atom (a) Ni dan (b) Br. Jari-jari lingkaran yang ditunjukkan merupakan besarnya distribusi spin orbital disepanjang pita energi.....	46
Gambar 4. 2	Jarak atom Br terhadap bidang Ni pada arah sumbu z , panjang ikatan, dan sudut ikatan antar atom pada NiBr_3 monolayer.....	48
Gambar 4. 3	Struktur Pita Energi Material NiBr_3 monolayer (a) tanpa dan (b) dengan efek <i>Spin-Orbit Coupling</i>	50
Gambar 4. 4	Struktur pita energi NiBr_3 monolayer dengan pemberian medan listrik eksternal 0, 5, 10, 15, 20, 25, dan 30 V/nm dengan efek SOC.....	53
Gambar 4. 5	Koefisien Seebeck terhadap Energi Fermi pada monolayer NiBr_3 dengan medan listrik 20 V/nm untuk variasi suhu 100 K, 200 K, dan 300 K.....	55
Gambar 4. 6	Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Nernst Anomali pada Suhu Rendah ($T = 100 \text{ K}$).....	57
Gambar 4. 7	Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Nernst Anomali pada Suhu Menengah ($T = 200 \text{ K}$).....	58
Gambar 4. 8	Pengaruh Medan Listrik terhadap Efek Nernst Anomali pada Suhu Tinggi ($T = 300 \text{ K}$).....	59
Gambar 4. 9	Pengaruh Suhu terhadap Efek Nernst pada Medan Listrik Eksternal Tetap ($E = 20 \text{ V/nm}$).....	60

DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1. Jadwal Rancangan Penelitian	36
Tabel 3. 2 Perangkat Lunak.....	39
Tabel 4. 1 Panjang ikatan Ni–Br (d_{Ni-Br} , Å), sudut ikatan Ni–Br–Ni ($\theta_{Ni-Br-Ni}$, °), dan <i>lattice constant</i> ($a = b$, Å). [1] (Tomar et al., 2019) [2] (Raw et al., 2012).....	48
Tabel 4. 2 Celah pita energi (E_g , eV) dan momen magnetic atom Ni (m_{Ni} , μ_B). [1] (Li et al., 2019) [2] (Tomar et al., 2019) [3] (Sun et al. (2015); Furness et al. (2020); Rezaei et al. (2025)).....	51



DAFTAR SINGKATAN



DFT	= <i>Density Functional Theory</i>
IoT	= <i>Internet of Things</i>
HF	= Hartree-Fock
CSF	= <i>Self-Consistent Field</i>
XC	= <i>Exchange-Correlation</i>
KS	= Kohn-Sham
LDA	= <i>Local Density Approximation</i>
GGA	= <i>Generalized Gradient Approximation</i>
PBE	= <i>Perdew–Burke–Ernzerhof</i>
PAO	= <i>Pseudo-Atomic basis Orbitals</i>
NC-DFT	= <i>Non-Collinear Density Functional Theory</i>
SOC	= <i>Spin-Orbit Coupling</i>
FM	= Ferromagnetik
MAE	= <i>Magnetic Anisotropy Energy</i>
NiBr ₃	= Material Nickel (III) Bromide
AHC	= <i>Anomalous Hall Conductivity</i>
ANE	= <i>Anomalous Nernst Effect</i>
BNNRs	= Boron Nitride Nanoribbons
ZT	= <i>Figure of Merit</i>
TMDCs	= <i>Transition Metal Dichalcogenides</i>
OpenMX	= <i>Open-source package for Material eXplorer</i>
BoltzTraP2	= Boltzmann Transport Properties, version 2