BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Perkembangan pesat dalam bidang Sains, Teknologi, dan Informasi mendorong pengembangan perangkat pemrosesan berbasis komputasi, yang menjadi fondasi penting dalam penelitian material canggih, termasuk material dua dimensi (2D) seperti halida logam transisi dan dikalkogenida. Penelitian material dua dimensi (2D), seperti halida logam transisi dan dikalkogenida yang menunjukkan potensi besar dalam teknologi termoelektrik dan spintronik. Material dua dimensi (2D) ini memiliki keunggulan dalam efisiensi energi dan stabilitas struktur atom, mengoptimalkan aplikasi suhu ruang dalam pengumpulan energi dan perangkat, mempertimbangkan disipasi panas, dan mempertahankan kinerja sistem secara stabil (He et al. 2017; Zhou et al., 2019).

Salah satu fenomena penting yang signifikan dalam bidang termoelektrik adalah efek Seebeck dan Nernst anomali, yang mampu mengonversi perbedaan suhu menjadi energi listrik secara efektif, terutama dalam sistem feromagnetik dan topologi (Nagaosa et al., 2010). Fenomena ini bergantung pada gradien suhu yang menghasilkan tegangan listrik melalui perpindahan pembawa muatan di dalam material. Peran panas terkait sebagai sumber energi termal yang menciptakan gradien suhu, tetapi yang dikonversi adalah perubahan temperatur ke energi listrik melalui perbedaan potensial yang dihasilkan (Aridi et al., 2021).

Pada sisi lain, efek Nernst anomali adalah fenomena termoelektrik transversal yang melibatkan arus listrik yang tegak lurus terhadap gradien suhu dan medan magnet. Efek Nernst berpotensi untuk meningkatkan efisiensi konversi energi, yang semakin diminati dalam aplikasi energi terbarukan dan perangkat berbasis energi rendah, seperti sensor dan perangkat *Internet of Things* (IoT) (Petsagkourakis et al., 2018; Mizuguchi & Nakatsuji, 2019).

Pengembangan material dua dimensi dengan kinerja termoelektrik yang tinggi menghadapi berbagai tantangan signifikan. Efisiensi termoelektrik sangat bergantung pada pengendalian sifat-sifat elektronik dan magnetik material, yang cenderung berubah ketika dipengaruhi oleh kondisi eksternal seperti medan listrik dan gradien suhu. Sejumlah penelitian telah mengamati bahwa monolayer halida logam transisi, seperti NiCl_2 (Abdillah et al., 2023) dan PdBr_3 (Syariati et al., 2024), mengalami perubahan struktur pita dan sifat magnetik yang signifikan saat terpapar oleh medan listrik. Hal ini menyebabkan transisi dari keadaan semikonduktor ke logam, yang secara langsung mempengaruhi efisiensi konversi energi termoelektrik (Syariati et al., 2024).

Penelitian sebelumnya yang terbaru oleh Prayitno et al. (2024), menunjukkan bahwa konfigurasi magnetik pada NiBr_2 dapat mempengaruhi koefisien Seebeck, yang merupakan parameter kunci dalam aplikasi termoelektrik. Dengan menerapkan medan listrik, distribusi muatan dalam material ini dapat diubah, yang berpotensi meningkatkan efisiensi konversi energi. Selain itu, efek Nernst anomali, yang berkaitan dengan respons material terhadap medan magnet dan suhu, juga diharapkan dapat dimodulasi melalui interaksi medan listrik. Penelitian ini bertujuan untuk memberikan pemahaman yang lebih dalam mengenai mekanisme yang mendasari fenomena ini, serta potensi aplikasi NiBr_2 dalam perangkat elektronik dan termal yang efisien. Namun, penelitian yang secara khusus mengkaji pengaruh medan listrik terhadap koefisien Seebeck dan Nernst, terutama pada material monolayer NiBr_3 masih tergolong sangat terbatas.

Untuk mengatasi tantangan dan permasalahan ini, penelitian sebelumnya telah menerapkan metode *Density Functional Theory* (DFT) untuk memodelkan karakteristik elektronik dan sifat termoelektrik dari material dua dimensi. Teknik ini, yang dikombinasikan dengan teori transportasi Boltzmann, memungkinkan analisis mendalam terhadap koefisien Seebeck dan Nernst pada beberapa monolayer logam trihalida, seperti NiCl_3 dan PdBr_3 . Studi DFT pada PdBr_3 menunjukkan bagaimana medan listrik dapat memodulasi struktur elektronik, yang memungkinkan material bertransisi dari kondisi logam ke

isolator serta meningkatkan sifat termoelektrik melalui pengaturan kelengkungan Berry (Abdillah et al., 2023). Pengaturan ini penting karena meningkatkan kontribusi kelengkungan Berry terhadap efek Nernst, yang secara langsung mempengaruhi kinerja perangkat termoelektrik (Mizuta & Ishii, 2016).

Penggunaan medan listrik untuk mengontrol sifat termoelektrik material dua dimensi seperti NiBr_3 menawarkan beberapa keunggulan yang signifikan. Salah satu keuntungan utama adalah kemampuan material ini untuk secara efektif meningkatkan koefisien Seebeck dan menghasilkan efek Nernst yang tinggi, yang keduanya merupakan elemen kunci dalam optimasi efisiensi energi termoelektrik. Kemampuan ini memberikan respons termoelektrik yang lebih optimal terhadap variasi suhu dan gradien termal. Selain itu, struktur monolayer dua dimensi pada NiBr_3 meningkatkan interaksi permukaan, yang sangat bermanfaat dalam aplikasi sensor dan pengumpulan energi, karena meningkatkan sensitivitas material terhadap perubahan lingkungan (Sakuraba et al., 2013; Twaha et al., 2016).

Faktor lain yang menguntungkan dari NiBr_3 adalah keberadaan *spin-orbit coupling* (SOC), yang menciptakan keadaan elektronik unik dan memiliki ciri khas. Keunikan ini dapat meningkatkan respons magnetik material serta mendukung sifat termoelektriknya. *Spin-orbit coupling* juga berperan penting dalam mengatur karakteristik elektronik yang diinginkan untuk aplikasi perangkat spintronik, sehingga memiliki potensi besar dalam teknologi pengumpulan energi dan perangkat dengan konsumsi daya rendah (Nagaosa et al., 2010).

Namun, terdapat sejumlah keterbatasan pada material dua dimensi seperti NiBr_3 . Salah satunya adalah stabilitas struktural yang cenderung rendah saat terpapar medan listrik tinggi, yang dapat mengurangi keandalan material dalam aplikasi jangka panjang. Selain itu, material NiBr_3 mengalami variasi dalam celah pita yang sulit dipertahankan secara konsisten, yang menjadi tantangan dalam pengaplikasian skala besar. Variabilitas celah pita dapat memengaruhi performa perangkat, terutama dalam aplikasi yang membutuhkan kestabilan sifat elektronik. Proses sintesis dan manipulasi material monolayer

kerap kali memerlukan teknik canggih, yang membutuhkan waktu dan biaya lebih tinggi, sehingga menambah kompleksitas dalam produksi dan implementasi praktis (He et al., 2017; Mizuguchi & Nakatsuji, 2019).

Penelitian ini mengusulkan pendekatan simulasi berbasis DFT untuk mengkaji secara mendalam pengaruh medan listrik terhadap efek Seebeck dan anomali Nernst pada monolayer NiBr_3 . Melalui simulasi ini, medan listrik eksternal telah diterapkan pada NiBr_3 untuk menganalisis perubahan respons termoelektrik dan magnetik, serta dampaknya terhadap struktur pita dan momen magnetik material. Pendekatan ini memiliki peluang penentuan intensitas medan listrik optimal untuk meningkatkan efisiensi termoelektrik seraya tetap mempertahankan stabilitas struktural NiBr_3 .

Dengan pemahaman yang lebih mendalam tentang ketergantungan sifat elektronik dan termoelektrik NiBr_3 terhadap medan listrik, penelitian ini berpotensi membuka peluang untuk aplikasi yang lebih luas dalam perangkat termoelektrik dan spintronik. Jika kontrol terhadap sifat elektronik dan termoelektrik dapat dicapai secara efisien, maka NiBr_3 dapat menjadi kandidat unggul dalam teknologi pengumpulan energi serta perangkat yang membutuhkan kestabilan performa termoelektrik dalam berbagai kondisi eksternal.

Penelitian ini menggunakan metode simulasi berbasis DFT yang dilengkapi dengan pengaruh *spin-orbit coupling* (SOC) untuk mengkaji pengaruh medan listrik terhadap sifat elektronik dan termoelektrik dari monolayer NiBr_3 . Tahapan pertama mencakup pemodelan struktur elektronik NiBr_3 menggunakan DFT, medan listrik eksternal divariasikan untuk mengeksplorasi perubahan dalam struktur pita dan momen magnetik material. Analisis ini bertujuan untuk mengidentifikasi titik transisi dari kondisi semikonduktor ke logam, yang merupakan informasi penting untuk memahami ketergantungan struktur elektronik NiBr_3 terhadap intensitas medan listrik (He et al., 2017; Syariati et al., 2024).

Langkah selanjutnya melibatkan karakterisasi termoelektrik dengan menerapkan teori transportasi Boltzmann untuk menghitung koefisien Seebeck

dan Nernst di bawah berbagai kondisi medan listrik. Metode ini memanfaatkan pendekatan waktu relaksasi guna memastikan hasil yang mencerminkan kondisi realistis dalam aplikasi termoelektrik. Evaluasi ini diharapkan dapat menentukan efisiensi optimal dari material dan kondisi medan listrik yang paling sesuai untuk aplikasi praktis. Pendekatan komprehensif ini memungkinkan karakterisasi menyeluruh dari NiBr_3 sebagai material termoelektrik, serta mengidentifikasi kondisi optimal untuk meningkatkan kinerja termoelektrik yang dapat mendukung aplikasi praktis dalam teknologi spintronik dan pengumpulan energi.

B. Rumusan Masalah

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

1. Bagaimana pengaruh SOC dan medan listrik eksternal terhadap struktur elektronik dan sifat magnetik monolayer Nickel (III) Bromide (NiBr_3)?
2. Apa dampak dari penerapan medan listrik terhadap struktur pita dan momen magnetik pada monolayer NiBr_3 ?
3. Bagaimana pengaruh medan listrik terhadap koefisien Seebeck dan efek Nernst anomali pada monolayer NiBr_3 ?
4. Dalam kondisi apa medan listrik dapat dimanfaatkan secara optimal untuk meningkatkan performa termoelektrik dari monolayer NiBr_3 ?

C. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah di atas, maka tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Menganalisis perubahan sifat elektronik dan magnetik monolayer NiBr_3 akibat adanya spin-orbit coupling dan medan listrik eksternal.
2. Mengevaluasi dampak penerapan medan listrik terhadap perubahan struktur pita dan momen magnetik pada monolayer NiBr_3 .

3. Mengukur pengaruh medan listrik terhadap koefisien Seebeck dan efek Nernst anomali pada monolayer NiBr_3 .
4. Menganalisis kondisi optimal penerapan medan listrik untuk meningkatkan performa termoelektrik dari monolayer NiBr_3 .

D. Manfaat

Adapun manfaat dari penelitian ini diharapkan mampu memberikan kontribusi yang baik untuk kedepannya. Berikut manfaat yang diperoleh dari penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Memberikan pemahaman baru tentang cara mengatur sifat material 2D menggunakan SOC dan medan listrik, yang berguna dalam pengembangan teknologi termoelektrik dan material masa depan.
2. Memberikan informasi mengenai pengaruh SOC pada sifat magnetik dan elektronik material NiBr_3 , yang memiliki potensi aplikasi dalam perangkat spintronik.
3. Mengidentifikasi kondisi optimal untuk meningkatkan efisiensi konversi energi termoelektrik, yang dapat bermanfaat bagi pengembangan material termoelektrik yang lebih baik untuk aplikasi industri dan teknologi hijau.
4. Berkontribusi pada pengembangan penelitian berbasis DFT dalam mengeksplorasi sifat-sifat material baru, yang dapat memperluas pemahaman tentang perilaku material dalam kondisi ekstrem.