

EFISIENSI SIFAT TERMO ELEKTRIK MATERIAL NiCl₂ MONOLAYER TERHADAP SUHU BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Raygha Sihab Putra
rayghasihabputa@gmail.com
Universitas Negri Jakarta

ABSTRAK

Teknologi yang terus berkembang sudah seharusnya mendorong para peneliti untuk berinovasi dalam pengembangan energi alternatif. Salah satu pendekatan yang dapat digunakan adalah dengan memanfaatkan energi panas yang terbuang ke lingkungan. Material monolayer NiCl₂ dengan sifat termoelektriknya, baik dari segi koefisien Seebeck, konduktivitas listrik, dan konduktivitas termal, memiliki potensi untuk diaplikasikan sebagai material termoelektrik yang efisien. Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari sifat termoelektrik dari material NiCl₂ monolayer melalui pendekatan Density Functional Theory (DFT). Perhitungan ini melibatkan analisis terhadap struktur elektronik dan sifat termoelektrik untuk menentukan nilai figure of merit (ZT) sebagai indikator efisiensi termoelektrik. Hasil penelitian menunjukkan bahwa pada suhu 300 K, nilai ZT mencapai puncaknya, berbanding terbalik dengan nilai power factor yang dihasilkan. Nilai ZT yang tinggi pada suhu ini disebabkan oleh penurunan koefisien Seebeck dan peningkatan konduktivitas termal. Hal ini menunjukkan bahwa sifat termoelektrik material NiCl₂ monolayer paling optimal pada suhu yang lebih rendah.

Kata Kunci: NiCl₂ monolayer, Density Functional Theory, koefisien Seebeck, konduktivitas listrik, konduktivitas termal, figure of merit.

ABSTRACT

The continuous development of technology should encourage researchers to innovate in the development of alternative energy. One approach that can be utilized is harnessing the waste heat released into the environment. The monolayer NiCl₂ material, with its thermoelectric properties including Seebeck coefficient, electrical conductivity, and thermal conductivity, holds potential for application as an efficient thermoelectric material. This study aims to investigate the thermoelectric properties of monolayer NiCl₂ material through the Density Functional Theory (DFT) approach. The calculations involve an analysis of the electronic structure and thermoelectric properties to determine the figure of merit (ZT) as an indicator of thermoelectric efficiency. The results show that at a temperature of 300 K, the ZT value reaches its peak, inversely proportional to the generated power factor. The high ZT value at this temperature is due to the decrease in the Seebeck coefficient and the increase in thermal conductivity. This indicates that the thermoelectric properties of the monolayer NiCl₂ material are most optimal at lower temperatures.

Keywords: NiCl₂ monolayer, Density Functional Theory, Seebeck coefficient, electrical conductivity, thermal conductivity, figure of merit.

PENDAHULUAN

Kebutuhan energi listrik meningkat di era globalisasi tanpa diimbangi pengembangan energi alternatif, disertai kurangnya perhatian terhadap penghematan energi, mengakibatkan ketidakmampuan dalam pemenuhan kebutuhan energi jangka panjang (Sasmita, 2019). Teknologi yang terus berkembang sudah seharusnya mendorong para peneliti untuk berinovasi dalam pengembangan energi alternatif (Sumarjo, 2017). Salah satu pendekatan yang dapat digunakan adalah dengan memanfaatkan energi panas yang terbuang ke lingkungan dari mesin yang sedang beroperasi, seperti pada pembangkit listrik tenaga gas dan uap yang saat ini hanya memiliki efisiensi sekitar 30 – 40%, artinya banyak panas yang

terbuang dari pembangkit listrik (Roekettino, 2010).

Termoelektrik merupakan metode langsung untuk mengubah energi panas menjadi energi listrik. Untuk melakukan konversi ini, digunakan sebuah perangkat yang disebut generator termoelektrik. Generator termoelektrik adalah alat yang memanfaatkan konduktivitas panas dari sebuah lempengan logam untuk menghasilkan tegangan listrik (Anwar, 2014). Material yang digunakan dalam generator termoelektrik terdiri dari dua jenis semikonduktor yang berbeda, yaitu tipe-p dan tipe-n. Prinsip kerja generator termoelektrik didasarkan pada efek Seebeck yang ditemukan oleh T.J. Seebeck pada tahun 1821. Efek Seebeck bekerja dengan menghubungkan dua jenis semikonduktor yang berbeda pada salah satu ujungnya, lalu memberikan suhu yang berbeda pada sambungan tersebut, sehingga menyebabkan perbedaan tegangan antara kedua ujung (Bangun, 2018).

Prinsip kerja generator termoelektrik yang menggunakan semikonduktor tipe-p (dengan kekurangan elektron) dan tipe-n (dengan kelebihan elektron) melibatkan pemanasan kedua logam, menyebabkan elektron pada logam yang dipanaskan bergerak lebih cepat daripada yang dingin. Perpindahan elektron dari logam panas ke logam dingin menciptakan medan listrik, yang menghasilkan tegangan listrik melalui sambungan termoelektrik. Besarnya tegangan listrik tergantung pada perbedaan suhu, dan sifat termoelektrik bisa dinilai dengan parameter figure of merit (ZT) yang mengukur efisiensi material sebagai termoelektrik (Goldsmid, 2016).

Hal yang penting dalam pembangkit listrik termoelektrik adalah materialnya. Material yang digunakan sebagai material termoelektrik umumnya menggunakan bahan yang bersifat semikonduktor karena bahan ini memiliki peluang yang besar dalam meningkatkan nilai ZT dengan melakukan modifikasi struktur kristal dan elektroniknya. Selain itu, material yang baik untuk termoelektrik adalah material yang mempunyai nilai koefisien Seebeck yang tinggi, nilai konduktivitas listrik yang tinggi, dan konduktivitas termal yang rendah. (Hyun-Sik, 2015)

Penelitian ini memanfaatkan Material $NiCl_2$ sebagai semikonduktor yang menjanjikan dalam aplikasi teknologi dengan sifat termoelektrik. Dengan struktur kristal yang unik, $NiCl_2$ memiliki potensi untuk konversi energi panas menjadi energi listrik melalui efek termoelektrik, memungkinkannya digunakan dalam berbagai aplikasi seperti pembangkit listrik termoelektrik, pendinginan termoelektrik, dan sensor suhu. Kestabilan kimia dan termal yang baik menjadikannya tahan terhadap kondisi lingkungan yang ekstrim, sementara kemampuan untuk dikendalikan secara elektronik dan didoping memungkinkan penyesuaian sifat termoelektriknya sesuai dengan kebutuhan aplikasi tertentu (Prayitno, 2023).

Penelitian ini akan banyak melihat perubahan pada sifat termoelektrik dengan melihat perubahan konduktivitas termal dan efek seebeck yang berubah ketika dilakukan perlakuan suhu yang berbeda pada skala monolayer material. Perhitungan skala monolayer dilakukan karena hal ini dapat merepresentasikan material secara bulk disamping proses komputasi yang akan berjalan dengan lebih cepat.

Berdasarkan uraian diatas maka akan dilakukan penelitian untuk mengetahui Efisiensi sifat Termoelektrik Material $NiCl_2$ monolayer terhadap Perubahan Suhu. Perhitungan sifat termoelektrik berbasis Density Functional Theory (DFT) dengan fungsi Energi Exchange-Correlation Generalized Gradient Approximation (GGA) diimplementasikan dengan OpenMX akan menjadi dasar metode pada penelitian ini (Ozaki, 2009). Dengan studi ini diharapkan memberikan pemahaman mengenai Material $NiCl_2$ secara khusus dan pengaruh suhu terhadap sifat termoelektrik material $NiCl_2$ monolayer yang memiliki aplikasi yang menjanjikan dalam perangkat termoelektrik sehingga memperluas jangkauan material dua dimensi untuk aplikasi spintronik di masa depan.

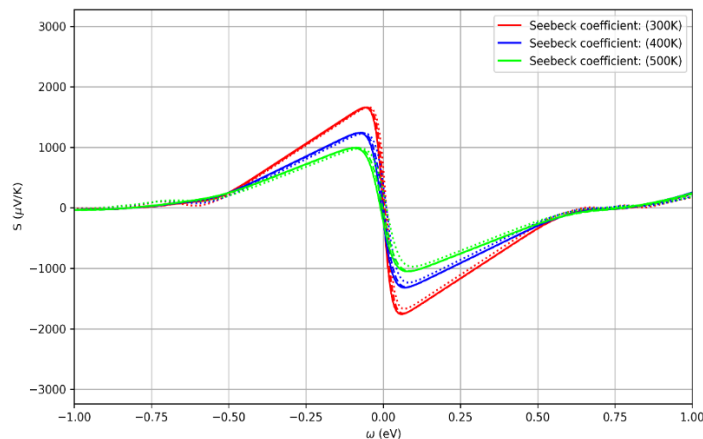
METODOLOGI

Penelitian ini menggunakan metode komputasi. Metode komputasi yang dilakukan yaitu dengan melakukan perhitungan sifat termoelektrik berbasis Density Functional Theory (DFT) dalam Generalized Gradient Approximation (GGA) yang diimplementasikan dengan OpenMX dan BoltzTrap (Ozaki et al., n.d.). OpenMX (Open source package for Material eXplorer) adalah paket perangkat lunak untuk simulasi material skala nano berdasarkan Density Functional Theory (DFT) (Hohenberg & Kohn, 1964; Kohn & Sham, 1965). Norm-conserving Pseudopotentials (Troullier & Martins, 1991) dan Pseudo-atomic Localized Basis Functions (Ozaki, 2003; Ozaki & Kino, 2004) digunakan dalam perhitungan struktur elektronik.

Perhitungan struktur elektronik dilakukan pada material NiCl₂ monolayer untuk mengetahui pengaruh perubahan suhu pada sifat termoelektrik material NiCl₂ monolayer. Perhitungan sifat termoelektriknya akan dideskripsikan melalui perubahan besaran koefisien seebeck, konduktivitas termal, dan konduktivitas listriknya.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Pada penelitian ini telah dilakukan penelitian mengenai termoelektrik berbasis Density Functional Theory (DFT). Penelitian ini menggunakan satu parameter input, yaitu parameter fisis, yang meliputi parameter suhu dengan suhu 300 K, 400 K, dan 500 K. Sifat termoelektrik yang dianalisa dalam penelitian ini adalah koefisien Seebeck, konduktivitas listrik, dan konduktivitas termal.



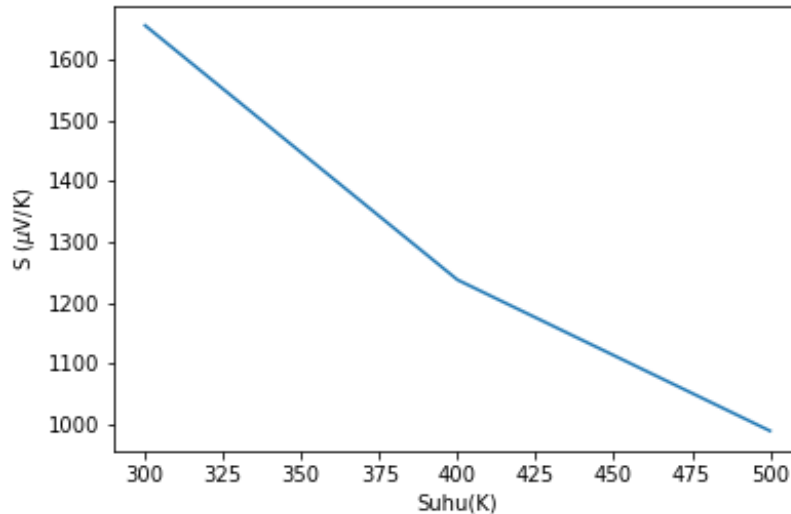
Gambar 15 Perbandingan Energi dengan koefisien seebeck

Hasil koefisien Seebeck yang didapatkan pada penelitian kali ini dapat dilihat pada gambar 15. Penelitian kali ini menunjukkan bahwa pada suhu 300 K memiliki nilai koefisien Seebeck tertinggi diantara suhu pada monolayer NiCl₂ dengan nilai koefisien Seebeck tertinggi sebesar 1657,97 $\mu\text{V/K}$ dan nilai min -1765.73 $\mu\text{V/K}$. Untuk suhu 400 yang memiliki nilai koefisien Seebeck terbesar kedua dengan nilai koefisien Seebeck sebesar 1237.31 $\mu\text{V/K}$ dan nilai min -1319.27 $\mu\text{V/K}$. Sedangkan untuk suhu 500 yang memiliki nilai koefisien Seebeck paling kecil dengan nilai koefisien Seebeck sebesar 988.182 $\mu\text{V/K}$ dan nilai min -1051.2 $\mu\text{V/K}$. Nilai koefisien Seebeck dari masing-masing monolayer NiCl₂ dapat dilihat pada tabel 3

Table 3. Nilai koefisien seebeck terhadap suhu

Suhu	Nilai Max	Nilai Min
300 K	1657,97 $\mu\text{V/K}$	-1765.73 $\mu\text{V/K}$
400 K	1237.31 $\mu\text{V/K}$	-1319.27 $\mu\text{V/K}$
500 K	988.182 $\mu\text{V/K}$	-1051.2 $\mu\text{V/K}$

Pada gambar 3 Juga disajikan grafik pengaruh dari suhu terhadap koefisien Seebeck. Dalam grafik tersebut terlihat bahwa dengan meningkatnya suhu, nilai dari koefisien seebeck mengalami penurunan. Hal tersebut dapat disimpulkan bahwasannya material NiCl₂ memiliki semikonduktor tipe-n yang mana memiliki muatan electron yang lebih tinggi

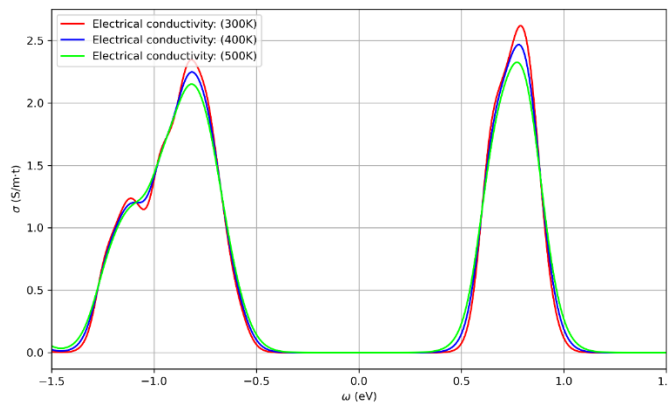


Gambar 16 Perbandingan suhu dengan koefisien seebeck

Pengambilan nilai koefisien seebeck ini diambil dengan menggeserkan energi fermi dengan menggunakan dopamine, penambahan dopamine ini dilakukan untuk melihat nilai maximum serta nilai minimum yang terdekat dari energi fermi pada keadaan dasar.

2. Konduktivitas listrik

Sifat termoelektrik kedua adalah konduktivitas listrik. Pada perhitungan BoltzTrap yang dihasilkan adalah nilai σ/r dengan satuan $(\Omega ms)^{-1}$ artinya terdapat kebergantungan nilai r (waktu relaksasi) terhadap nilai konduktivitas listrik. Pada penelitian ini dilakukan plot nilai σ/r .



Gambar 17 Perbandingan Energi dengan konduktivitas listrik

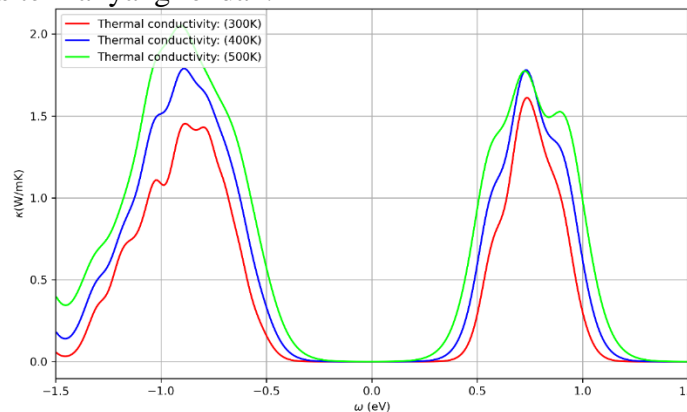
Pada penelitian kali ini, konduktivitas elektrik pada material monolayer NiCl₂ dihitung dengan menerapkan pendekatan constant relaxation-time approximation (CRTA) yang mana menganggap bahwa waktu relaksasi dari elektron dianggap sebagai konstan (pada penelitian kali ini diambil nilai $\tau = 10-14$ s). Terlihat pada gambar perbandingan energi dengan konduktivitas listrik nilai σ/r , pada suhu 300 K memiliki nilai konduktivitas yang lebih besar dengan yang lainnya, hal ini menandakan bahwasannya semakin tinggi suhu yang diberikan pada materialnya, maka konduktivitas semakin kecil nilainya.

Idealnya untuk mendapatkan nilai ZT dan Power Factor termoelektrik yang tinggi,

maka nilai konduktivitas listrik nya pun harus tinggi. Hal ini juga sejalan dengan nilai koefisien seebeck yang mana setiap suhunya semakin menurun, maka nilai dari konduktivitas listrik semakin meningkat.

3. Konduktivitas panas

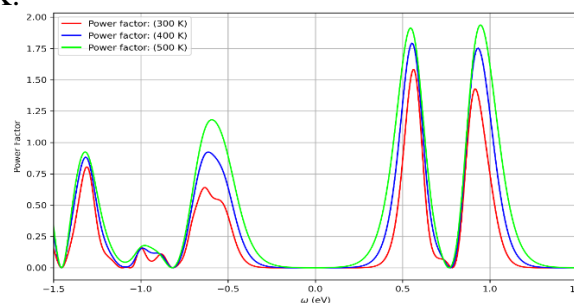
Sama seperti konduktivitas elektron, pada perhitungan konduktivitas termal dari kontribusi elektron digunakan juga pendekatan constant relaxation-time approximation (CRTA) yang mana menganggap bahwa waktu relaksasi dari elektron dianggap sebagai konstan (pada penelitian kali ini diambil nilai $\tau = 10^{-14}$ s). Hasil penelitian menunjukkan bahwa pada suhu 500 K memiliki nilai konduktivitas termal elektron terbesar diantara ketiga suhu, terlihat pada gambar bahwansannya dengan meningkatnya suhu maka nilai dari konduktivitas termalnya meningkat. Dikarenakan nilai konduktivitas termal merupakan nilai pembagi dari ZT, maka untuk mendapatkan nilai ZT terbaik dibutuhkan suhu pada kondisi konduktivitas termal yang rendah.



Gambar 18 Perbandingan Energi dengan konduktivitas termal

4. Power factor

Salah satu hal yang penting dalam perhitungan nilai figure of merit (ZT) adalah power factor. Power factor didapatkan dari perkalian antara koefisien Seebeck kuadrat dengan konduktivitas listrik. Hubungan antara power factor dengan ZT adalah berbanding lurus, apabila nilai power factor nya semakin besar maka nilai ZT nya pun akan semakin besar. Gambar 19 menampilkan hasil plot nilai power factor terhadap energi dengan variasi suhu 300 K, 400 K, dan 500 K.



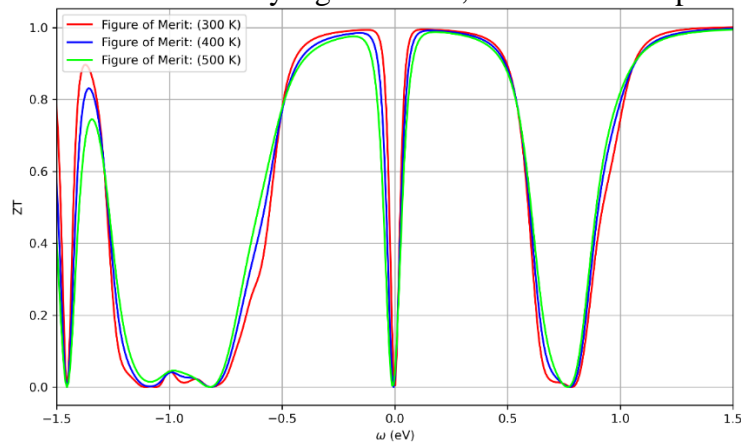
Gambar 19 Perbandingan Energi dengan Power factor

Pada gambar 19 menunjukkan bahwa nilai power factor mempunyai trend meningkat seiring dengan peningkatan temperatur. Pada temperatur 500 K didapatkan nilai Power Factor yang memiliki nilai paling tinggi . Sering kali diklaim apabila nilai power factor nya semakin tinggi maka dapat lebih banyak menghasilkan energi untuk memindahkan lebih banyak panas. Sehingga gambar 19 menunjukkan bahwa semakin tinggi temperatur maka semakin besar nilai Power Factor nya atau semakin banyak energi yang dihasilkan untuk memindahkan lebih banyak panas

5. Figure of merit (ZT)

Dalam perhitungan termoelektrik perlu dilakukan perhitungan untuk mengetahui seberapa besar nilai efisiensi suatu material. Nilai efisiensi tersebut bisa diketahui dari nilai figure of merit nya. Nilai ini bisa dijadikan sebagai acuan seberapa baik material ini digunakan sebagai material termoelektrik. Semakin besar nilai figure of merit nya maka semakin baik material digunakan sebagai material termoelektrik. Nilai ini bisa dihitung apabila ketiga sifat termoelektrik berupa koefisien Seebeck, konduktivitas listrik, dan konduktivitas termal elektron dan lattice sudah diketahui.

Hasil nilai ZT yang didapatkan pada penelitian kali ini disajikan pada gambar 20. Berbanding terbalik dengan nilai power factor yang dihasilkan, pada suhu 300 K memiliki nilai ZT yang paling tinggi diantara yang lainnya. Hal ini sejalan dengan bagaimana nilai dari koefisien seebeck yang memiliki trend menurun serta konduktivitas thermal yang memiliki nilai semakin naik. Hal ini menunjukkan bahwasannya semakin kecil suhu yang diberikan maka sidat dari termoelektrik yang diberikan, akan semakin optimal.



Gambar 20 Perbandingan Energi dengan Figure of Merite

KESIMPULAN

Adapun kesimpulan yang dapat diambil dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Telah berhasil dilakukan perhitungan struktur elektronik dan sifat termoelektrik berupa nilai koefisien Seebeck (S), konduktivitas termal (κ), dan konduktivitas listrik (σ) material monolayer NiCl₂ dengan metode komputasi menggunakan Density functional theory (DFT).
2. Nilai ZT maksimal dari penelitian ini didapatkan pada temperatur 300 K.
3. Nilai ZT memiliki sifat dimana ketika diberi suhu yang semakin tinggi nilainya semakin kecil.
4. Nilai yang diambil pada penelitian ini menggunakan nilai yang paling tinggi dengan mendekati nol, yang mana nilai tersebut keika materialnya diberi doping positif untuk energi fermi yang bernilai positif serta doping yang negatif untuk doping yang negative.

DAFTAR PUSTAKA

- . R., S. Anwar, and S. P. Sari, "Generator Mini dengan Prinsip Termoelektrik dari Uap Panas Kondensor pada Sistem Pendingin," *J. Rekayasa Elektr.*, vol. 10, no. 4, pp. 180–185, 2014, doi: 10.17529/jre.v10i4.1108.
- Bangun Dan Karakteristik Gener. Termoelektr. Dengan Menggunakan Energi Panas Sinar Matahari, pp. 317–322, 2018.
- H. A. AL FIKRI, "Efektifitas Modul Peltier Tec-12706 Sebagai Generator Dengan Memanfaatkan Energi Panas Dari Modul Peltier Tec-12706," Univ. Muhammadiyah Surakarta, 2016.
- H. Rafika, R. I. Mainil, and A. Aziz, "Kaji Eksperimental Pembangkit Listrik Berbasis

- Thermoelectric Generator (Teg) Dengan Pendinginan Menggunakan Udara,” *J. Sains dan Teknol.*, vol. 15, no. 1, pp. 7–11, 2017,
- H. J. Goldsmid, *Optimisation and selection of semiconductor thermoelements*, vol. 121. 2016.
- J. Delly, M. Hasbi, and I. fitra Alkhoiron, “Studi Penggunaan Modul Thermoelektrik Sebagai Sistem Pendingin Portable,” *ENTHALPY – J. Ilm. Mhs. Tek. Mesin*, vol. 1, no. 1, pp. 50–55, 2016.
- J. M. Adhidewata and P. T. Boltzmann, “Fenomena Termoelektrik,” vol. d, no. 2, pp. 1–11, 2019.
- J. Sumarjo, A. Santosa, and M. I. Permana, “Pemanfaatan Sumber Panas Pada Kompor Menggunakan 10 Termoelektrik Generator Dirangkai Secara Seri Untuk Aplikasi Lampu Penerangan,” *J. Mesin Teknol. (SINTEK Jurnal)*, vol. 11, no. 2, pp. 123–128, 2017, [Online]. Available: jurnal.umj.ac.id/index.php?journal=sintek.
- K. A. Pratama, E. Suyanto, and W. Suane, “PERAGA FENOMENA KELISTRIKAN Pratama ., Suyanto ., Suane . –,” pp. 224–236, 2018.
- Khairunnas and M. Gusman, “Analisis Pengaruh Parameter Konduktivitas , Resistivitas dan TDS Terhadap Salinitas Air Tanah Dangkal pada Kondisi Air Laut Pasang dan Air Laut Surut di Daerah Pesisir Pantai Kota Padang,” *J. Bina Tambang*, vol. 3, no. 4, pp. 1751–1760, 2018.
- M . W. Aminullah, H. Setiawan, A. Huda, H. Samaulah, S. Haryati, and M. Bustan, “Pengaruh Komposisi Material Semikonduktor Dalam Menurunkan Energi Band Gap dan Terhadap Konversi Gelombang Mikro,” vol. 13, no. 2, pp. 65–70, 2019.
- M. Gandengan, I. Agustina, and D. Astuti, “Penentuan Konduktivitas Termal Logam Tembaga , Kuningan , dan,” vol. 6, pp. 30–34, 2015, [Online].
- N. Putra, R. A. Koestoer, M. Adhitya, A. Roekettino, and B. Trianto, “Potensi Pembangkit Daya Termoelektrik Untuk Kendaraan Hibrid,” *MAKARA Technol. Ser.*, vol. 13, no. 2, pp. 53–58, 2010, doi: 10.7454/mst.v13i2.466.
- R. Bangun, D. A. N. Karakteristik, and N. I. Kamal, “Sinar Matahari,” Ranc. S. A. Sasmita, M. T. Ramadhan, M. I. Kamal, and Y. Dewanto, “Alternatif Pembangkit Energi Listrik Menggunakan Prinsip Termoelektrik Generator,” *TESLA J. Tek. Elektro*, vol. 21, no. 1, p. 57, 2019, doi: 10.24912/tesla.v21i1.3249.
- S. C. Puspita, H. Sunarno, and B. Indarto, “Generator Termoelektrik untuk Pengisian Aki,” *J. Fis. dan Apl.*, vol. 13, no. 2, p. 84, 2017, doi: 10.12962/j24604682.v13i2.2748.
- S. K. Wijaya, “Semikonduktor,” *Diktat Kuliah Elktronika I*, pp. 119–13
- S. Purwiyanti, F. X. A. Setyawan, W. Selviana, and D. Purnamasari, “Aplikasi Efek Peltier Sebagai Kotak Penghangat dan Pendingin Berbasis Mikroprosessor Arduino Uno,” *Electr. - J. Rekayasa dan Teknol. Elektro*, vol. 11, no. September, pp. 1–6, 2017.
- S. Tidak, B. Tembaga, G. Kaca, N. Klasifikasi, and S. I. Bahan, “Bahan kuliah fisika semikonduktor,” pp. 1–29.