

INTISARI

KAJIAN EFEK TERMOELEKTRIK NERNST ANOMALI PADA MATERIAL DUA DIMENSI *LAYERED TUNGSTEN DITELLURIDE*

Oleh

ABDURRAFI AHSAN ALGHIFARI

20/459191/PA/19852

Penelitian ini menggali sifat topologi yang unik dan fenomena termoelektrik anomali pada material dua dimensi Tungsten Ditelluride (WTe_2), khususnya pada struktur $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ *monolayer* dan $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ *bilayer*, dengan menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan teknik *post-processing*. Hasil penelitian menunjukkan keberadaan sifat topologi non-trivial pada kedua varian material tersebut, dengan penemuan yang menonjol adalah adanya *Strong Berry Curvature* pada $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ *bilayer*, yang mencapai nilai puncak 1000 \AA^{-2} di jalur $\Gamma - X$, menandakan potensi signifikan dalam aplikasi berbasis sifat kuantum. Lebih lanjut, analisis terhadap konduktivitas Hall Anomali (AHC) menyingkapkan perbedaan mencolok antara $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ *monolayer* dan $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ *bilayer*, dengan AHC pada struktur *bilayer* mencapai nilai yang 1000 kali lebih besar. Pada suhu 100K, nilai puncak AHC untuk $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ *bilayer* tercatat pada -650 dan 450 S/m untuk energi -0,335 dan -0,255 eV berturut-turut, menunjukkan responsivitas termoelektrik yang luar biasa. Perhitungan koefisien Nernst Anomali melalui relasi Mott memberikan nilai maksimum $0,1 \mu\text{V/K}$ untuk $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ *bilayer*, jauh melampaui $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ *monolayer* yang hanya mencapai $5 \cdot 10^{-5} \mu\text{V/K}$. Sementara itu, koefisien Seebeck yang dihitung sebagai pembandingan menunjukkan nilai $20 \mu\text{V/K}$ untuk $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ *monolayer* dan $30 \mu\text{V/K}$ untuk $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ *bilayer*, menunjukkan bahwa hanya $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ *bilayer* yang memiliki sifat Termoelektrik Nernst Anomali yang signifikan. Dengan demikian, $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ *bilayer* adalah material yang menjanjikan dalam pengembangan perangkat termoelektrik, sementara material $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ *monolayer* perlu dikaji lebih dalam untuk mengetahui potensi dari material ini untuk perangkat termoelektrik.

Kata Kunci: Efek Hall Anomali, Efek Nernst Anomali, Sifat Topologi, Teori Fungsional Kerapatan, Tungsten Ditelluride

ABSTRACT

A STUDY OF ANOMALOUS NERNST EFFECT OF TWO DIMENSIONAL LAYERED TUNGSTEN DITELLURIDE

By

ABDURRAFI AHSAN ALGHIFARI

20/459191/PA/19852

This study delves into the unique topological properties and anomalous thermoelectric phenomena in two-dimensional Tungsten Ditelluride (WTe_2), particularly focusing on the $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ monolayer and $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ bilayer structures, employing Density Functional Theory (DFT) methods and post-processing techniques. The research findings reveal the presence of non-trivial topological properties in both material variants, with a notable discovery being the presence of strong Berry Curvature in the $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ bilayer, peaking at 1000 \AA^{-2} along the $\Gamma - X$ path, indicating significant potential for quantum-based applications. Further analysis on the Anomalous Hall Conductivity (AHC) unveils a stark contrast between the $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ monolayer and $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ bilayer, with the AHC in the bilayer structure reaching values 1000 times greater. At a temperature of 100K, peak AHC values for the $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ bilayer were recorded at -650 and 450 S/m for energies of -0,335 and -0,255 eV respectively, showcasing exceptional thermoelectric responsiveness. Mott relation-based calculations of the Anomalous Nernst Coefficient yield a maximum value of $0,1 \mu\text{V/K}$ for the $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ bilayer, far surpassing the $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ monolayer, which only reaches $5 \cdot 10^{-5} \mu\text{V/K}$. Meanwhile, comparative Seebeck coefficient calculations reveal values of $20 \mu\text{V/K}$ for the $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ monolayer and $30 \mu\text{V/K}$ for the $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ bilayer, indicating that only the $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ bilayer exhibits significant Anomalous Nernst Thermoelectric properties. Thus, the $\text{T}_d\text{-WTe}_2$ bilayer emerges as a promising material for the development of thermoelectric devices, while the $1\text{T}'\text{-WTe}_2$ monolayer requires further exploration to uncover its potential for thermoelectric applications.

Keywords : Anomalous Hall Effect, Anomalous Nernst Effect, Density Functional Theory, Topological Properties, Tungsten Ditelluride.