

INTISARI

STUDI TEORETIS EFEK NERNST ANOMALI PADA *MONOLAYER* MnX_3 ($X = F, Cl, Br, I$) MENGGUNAKAN PENDEKATAN DENSITY-FUNCTIONAL THEORY

oleh

ALBERT FERNANDO FILIPUS

21/478097/PA/20731

Kajian komputasional berbasis *first-principles* dilakukan untuk menyelidiki sifat termoelektrik sistem dua dimensi monolayer mangan trihalida MnX_3 ($X = F, Cl, Br, I$). Struktur elektronik dihitung menggunakan *density functional theory* (DFT) dengan fungsional Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE), kemudian dilakukan perhitungan *post-processing* melalui metode Fukui–Hatsugai–Suzuki (FHS) untuk memperoleh *Berry curvature* dan konduktivitas Hall anomali (AHC). Perhitungan konduktivitas listrik dan konduktivitas termal diperoleh menggunakan teori transport Boltzman. Berdasarkan parameter tersebut, koefisien Nernst dan *figure of merit* (ZT) dihitung untuk mengevaluasi performa termoelektrik material.

Hasil menunjukkan bahwa pada struktur pita MnX_3 yang melibatkan SOC, terbentuk celah energi pada kanal spin mayoritas, menandakan perubahan sifat topologis pita. Sistem MnF_3 dan $MnBr_3$ menunjukkan fase topologis non-trivial dengan bilangan Chern $C = -1$, sedangkan $MnCl_3$ memiliki nilai $C = 1$. Nilai koefisien Nernst tertinggi diperoleh pada $MnCl_3$, yaitu $N = 102.05 \mu V/K$ pada suhu 100 K di daerah *electron-doped*, diikuti $MnBr_3$ dengan $N = 96.6 \mu V/K$ pada kondisi *hole-doped*. Nilai ZT maksimum yang diperoleh adalah $ZT = 3.5 \times 10^{-3}$ untuk $MnCl_3$ dan $ZT = 2.8 \times 10^{-3}$ untuk $MnBr_3$. Hasil ini menunjukkan potensi MnX_3 sebagai kandidat material termoelektrik dua dimensi yang menjanjikan, khususnya untuk aplikasi berbasis *Anomalous Nernst Effect* (ANE).

Kata kunci: Efek Hall Anomali, Efek Nernst Anomali, Sifat Topologi, Teori Fungsional Kerapatan, Mangan Trihalida

ABSTRACT

Theoretical Study of the Anomalous Nernst Effect in MnX_3 ($X = F, Cl, Br, I$) Monolayers Using a Density Functional Theory Approach

by ALBERT FERNANDO FILIPUS

A *first-principles*-based computational study was carried out to investigate the thermoelectric properties of two-dimensional monolayer manganese trihalide systems MnX_3 ($X = F, Cl, Br, I$). The electronic structure was calculated using *density functional theory* (DFT) with the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) functional, followed by *post-processing* calculations using the Fukui–Hatsugai–Suzuki (FHS) method to obtain the *Berry curvature* and anomalous Hall conductivity (AHC). The electrical conductivity and thermal conductivity were obtained using Boltzmann transport theory. Based on these parameters, the Nernst coefficient and the *figure of merit* (ZT) were calculated to evaluate the thermoelectric performance of the materials.

The results show that in the MnX_3 band structures involving SOC, an energy gap is formed in the majority spin channel, indicating a change in the topological nature of the bands. The MnF_3 and $MnBr_3$ systems exhibit non-trivial topological phases with a Chern number of $C = -1$, while $MnCl_3$ has a value of $C = 1$. The highest Nernst coefficient is obtained for $MnCl_3$, namely $N = 102.05 \mu V/K$ at a temperature of 100 K in the *electron-doped* region, followed by $MnBr_3$ with $N = 96.6 \mu V/K$ under *hole-doped* conditions. The maximum ZT values obtained are $ZT = 3.5 \times 10^{-3}$ for $MnCl_3$ and $ZT = 2.8 \times 10^{-3}$ for $MnBr_3$. These results indicate the potential of MnX_3 as a promising two-dimensional thermoelectric material candidate, particularly for applications based on the *Anomalous Nernst Effect* (ANE).

Keywords: Anomalous Hall Effect, Anomalous Nernst Effect, Topological Properties, Density Functional Theory, Manganese Trihalides