

INTISARI

FORMASI SISTEM *SILICON CARBIDE* (3C-SiC) DENGAN PENGOTOR STRONTIUM (Sr) : KOMPUTASI BERBASIS DFT (*DENSITY FUNCTIONAL THEORY*)

Oleh

Hillery Sucihati Bagariang

19/448665/PPA/05748

Silicon Carbide (SiC) dalam sistem bahan bakar nuklir TRISO (Tristructural Isotropic) merupakan bahan yang berfungsi sebagai *barrier* untuk mencegah pelepasan produk fisi ke lingkungan. Untuk produk fisi berupa gas CO dan CO^2 , SiC secara efektif mampu untuk mengikat sehingga tidak terjadi kebocoran ke lingkungan. Namun dalam beberapa penelitian untuk produk fisi berupa atom berat (Ag, Cs, 3H dan Sr) menunjukkan bahwa terjadi pelepasan produk fisi di TRISO. Pada penelitian ini telah dilakukan kajian komputasi untuk mengetahui kestabilan secara energi. Pada sistem 3C-SiC *defect* Sr dilakukan penelitian *defect* dengan dua jenis *defect* yakni substitusi dan interstisial menggunakan metode DFT (*Density Functional Theory*). Hasil yang diperoleh dari energi formasi *defect* substitusi atom Sr yang paling stabil secara energi adalah sebesar 7,7 eV. Dalam penelitian ini juga dilakukan perhitungan substitusi dengan supersel 216 atom. Hasil penelitian yang diperoleh tidak jauh berbeda dengan supersel 64 atom yaitu sebesar 7,56 eV. Selanjutnya diperoleh hasil perhitungan energi formasi yang paling rendah dari beberapa konfigurasi interstisial Sr adalah sebesar 14,63 eV. Hasil ini menunjukkan bahwa Sr lebih stabil secara energi pada konfigurasi *defect* substitusi.

Kata-kata kunci : DFT, Supersel, SiC, *Defect* Sr, Energi formasi.

ABSTRACT

FORMATION OF THE STRONTIUM IMPURITY IN SILICON CARBIDE (3C-SiC): *COMPUTATIONAL STUDY BASED ON DFT (DENSITY FUNCTIONAL THEORY)*

By

Hillery Sucihati Bagariang

19/448665/PPA/05748

Silicon Carbide (SiC) in the TRISO (Tristructural Isotropic) nuclear fuel system is a material that works to prevent the release of fission product from the fuel to the environment. For fission products such as CO and CO_2 gases, SiC is effectively able to bind but some research shows that there is a release of fission product (Ag, Cs, 3H , and Sr) in TRISO. In this study, a computational study has been conducted to determine energy stability. We conduct a defect Sr with substitutional and interstitial using the DFT (Density Functional Theory) method. We find that the most energy stable configuration is substitutional Sr, whose formation energy is 7.7 eV. In this study, we perform substitutional calculations with a supercell consisting of 216 atoms. The obtained formation energy converges with 64 atoms supercell by 7.56 eV. Furthermore, supercell the smallest formation energy of the interstitial configurations is 14.63 eV. This result indicates that Sr is more stable in the substitutional site. On the other hand, Sr will not be easily released from SiC.

Keywords : DFT, Supercell, SiC, Defect Sr, Formation energy.