

DAFTAR ISI

Halaman Judul	i
Halaman Sampul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	iv
Halaman Persembahan	v
Halaman Motto	vi
PRAKATA	vii
DAFTAR ISI	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL	xiii
INTISARI	xiv
ABSTRACT	xv
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	5
1.4 Tujuan Penelitian	5
1.5 Manfaat Penelitian	5
II TINJAUAN PUSTAKA	6
III LANDASAN TEORI	9
3.1 Sistem Banyak Partikel	10
3.1.1 Pendekatan Born-Oppenheimer	12
3.2 Pendekatan Hartree-Fock	13

3.3	Prinsip <i>Dasar Density Functional Theory</i>	15
3.3.1	Teorema Hohenberg-Kohn	15
3.3.2	Persamaan Kohn-Sham	18
3.3.3	Fungsional Pertukaran-Korelasi	20
3.4	Struktur Kristal	22
3.4.1	Gelombang Datar dan Zona Brillouin	23
3.5	Performa Bahan Bakar TRISO	25
3.6	Silikon Karbida	25
3.6.1	Struktur Kristal Silikon Karbida	26
3.7	Sr (Strontium)	27
3.8	Energi Formasi	28
3.9	Simetri dan <i>Point Group</i>	29
IV	METODOLOGI PENELITIAN	32
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian	32
4.2	Sarana Penelitian	32
4.3	Tahapan Penelitian	34
4.3.1	Studi Literatur	36
4.3.2	Perhitungan Komputasi	36
V	HASIL DAN PEMBAHASAN	46
5.1	Optimasi Konstanta Kisi dan Konstruksi 3C-SiC	46
5.1.1	Variasi <i>K-point</i>	46
5.1.2	Variasi <i>Energi Ambang</i>	48
5.1.3	Optimasi Kisi	50
5.2	Konstruksi Unit Sel dan Super sel	51
5.3	Geometri Optimasi 3C-SiC	52
5.3.1	Substitusi Sr pada atom Si	52
5.3.2	Substitusi Sr pada atom C	53
5.3.3	Interstitial Antibonding Sr antara atom Si dan C	54
5.3.4	Interstitial Bondcenter Sr antara atom Si dan C	54
5.3.5	Interstitial Heksagonal Sr antara atom Si dan C	55
5.3.6	Interstitial Oktahedral Sr antara atom Si dan C	56
5.3.7	Substitusi Sr di Si sistem 216 atom	56
5.4	Energi Formasi	57

5.4.1	Perhitungan potensial kimia silikon (Si), potensial kimia karbon (C) dan potensial kimia strontium (Sr)	58
5.4.2	Energi formasi sistem <i>defective crystal</i> dalam SiC	59
5.5	Energi Relaksasi	62
5.6	Distorsi	64
5.6.1	Distorsi pada Substitusi Sr di SiC	64
5.7	Simetri Grup Kristal	66
VI KESIMPULAN DAN SARAN		68
6.1	Kesimpulan	68
6.2	Saran	69
DAFTAR PUSTAKA		70
LAMPIRAN		76

DAFTAR GAMBAR

3.1	<i>K-point</i> didalam zona Brillouin.	24
3.2	Gambar optimasi struktur dari 3C-SiC (b) Empat atom Silikon tetangga dari atom karbon yang membentuk tetrahedral dengan enam L yakni jarak antar atom karbon tetangga pertama yang panjangnya sama.	31
4.1	Komputasi serial dan Komputasi Paralel.	33
4.2	<i>Flow-chart</i> Proses Penelitian.	34
4.3	Algoritma Perulangan atau <i>Self-Consistent Field</i> (SCF).	35
4.4	Input file dari unit vektor pada program <i>Phase Viewer</i>	40
4.5	Input file dari unit vektor pada program <i>Phase</i> . Bola berwarna abu-abu menunjukkan atom C, dan bola berwarna kuning menunjukkan atom Si.	40
4.6	Tampilan pengulangan pada koordinat sumbu x, y dan z pada Program <i>Phase Viewer</i> untuk konstruksi super sel.	41
4.7	(a) unit sel dan (b) super sel 3C-SiC. Bola berwarna abu-abu menunjukkan atom C, dan bola berwarna kuning menunjukkan atom Si.	42
4.8	Struktur substitusi Sr pada SiC (a) Substitusi Sr di Si atau C (64 atom) (b) Substitusi Sr di Si (216 atom).	43
4.9	Struktur interstisial Sr pada SiC (a) Interstisial Antibonding Sr pada SiC (b) Interstisial Bondcenter Sr pada SiC (c) Interstisial Heksagonal Sr pada SiC (d) Interstisial Oktahedral Sr pada SiC.	43
5.1	Cacah <i>k-points</i> terhadap energi sistem perhitungan.	47
5.2	Cacah <i>k-points</i> terhadap waktu perhitungan.	47
5.3	Energi ambang terhadap energi sistem perhitungan.	49
5.4	Energi ambang terhadap waktu perhitungan.	49
5.5	Data hasil kalkulasi kisi yang direpresentasikan oleh V dengan E menggunakan DFT dan <i>fitting</i> BM-EOS.	51
5.6	Struktur kristal Sr mensubstitusi 1 atom Si pada super sel SiC. Hasil kalkulasi dari struktur kristal Sr mensubstitusi 1 atom Si pada super sel 64 atom SiC.	53

5.7	Struktur kristal Sr mensubstitusi 1 atom C pada super sel SiC. Hasil kalkulasi dari struktur kristal Sr mensubstitusi 1 atom C pada super sel 64 atom SiC.	53
5.8	Struktur Intertstitial Sr pada super sel SiC (a) Geometri posisi Antibonding (b) <i>Interstitial</i> Antibonding Sr pada SiC (C) Hasil kalkulasi <i>Intertstitial</i> Sr pada SiC.	54
5.9	Struktur <i>Interstitial</i> Bondcenter Sr pada super sel SiC (a) Geometri posisi Bondcenter (b) <i>Interstitial</i> Bondcenter Sr pada SiC (C) Hasil kalkulasi <i>interstitial</i> Bondcenter Sr pada SiC.	55
5.10	Struktur <i>Interstitial</i> Heksagonal Sr pada super sel SiC (a) Geometri posisi Heksagonal Sr (b) <i>Interstitial</i> Heksagonal Sr pada SiC (C) Hasil kalkulasi <i>Interstitial</i> Heksagonal Sr pada SiC. . .	55
5.11	Struktur <i>interstitial</i> Sr pada super sel SiC (a) Geometri posisi Oktahedral (b) <i>Interstitial</i> Oktahedral Sr pada SiC (C) Hasil kalkulasi <i>Interstitial</i> Oktahedral Sr pada SiC.	56
5.12	Struktur kristal Sr mensubstitusi 1 atom Si pada super sel SiC. Hasil kalkulasi dari struktur kristal Sr mensubstitusi 1 atom Si pada super sel 216 atom.	57
5.13	Sistem <i>Defective</i> vs Energi Formasi (eV). SSi:(Substitusi Ag di Si), SC: (Substitusi Ag di C), AB: (Interstitial Antibonding), BC: (Interstitial Bondcenter), HG: (Interstitial Heksagonal), dan OH: (Interstitial Oktahedral).	61
5.14	Plot distribusi kerapatan muatan pada sistem (a)pristin, (b) SSi.	62
5.15	Jalur reaksi sistem Substitusi Sr di Si.	64
5.16	<i>Bondlength</i> jarak antara Si dengan Sr (La) dan jarak antar atom tetangga pertama Sr yakni 4 atom Si (Lb).	65
5.17	<i>Bondlength</i> jarak antara Si dengan Sr (La) dan jarak antar atom tetangga pertama Sr yakni 4 atom Si (Lb).	66
5.18	(a) Gambar optimasi struktur dari 3C-SiC dengan <i>defect</i> Sr (b) Empat atom Silikon tetangga dari atom Sr yang membentuk tetrahedral dengan enam L yakni jarak antar atom silikon tetangga pertama yang panjangnya sama.	67

DAFTAR TABEL

3.1	Operasi simetri beserta elemen dan simbolnya.	29
3.2	Tabel karakteristik <i>point group</i> . T_d	30
4.1	Spesifikasi HPC LIPI	33
5.1	Energi formasi hasil perhitungan dari substitusi dan interstisial Sr pada SiC (eV).	59
5.2	Energi Relaksasi pada substitusi dan interstisial Sr pada SiC (eV).	63
5.3	Perhitungan Distorsi L0 (\AA), panjang L (\AA) dan (ΔV).	64