

Studi Komputasi dari Sifat Elastis Fe₃Ni₂ dan Fe₆Ni₃Co Menggunakan Density Functional Theory = Computational Study of the Elastic Properties of Fe₃Ni₂ and Fe₆Ni₃Co Using Density Functional Theory

Edward Chrisman, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920528167&lokasi=lokal>

Abstrak

Studi komputasi adalah studi yang ditentukan dari perhitungan struktur elektronik berupa material, seperti Fe, Ni, dan Co. Struktur kristal berupa material Fe, Ni, dan Co yang dikomputasikan adalah Fe₃Ni₂ dan Fe₆Ni₃Co. Struktur Fe₆Ni₃Co yang didapatkan dengan mengganti Ni pada Fe₃Ni₂ dengan Co. Studi ini telah dilakukan dengan menggunakan Density Functional Theory (DFT) melalui metode atomistik, optimasi geometri, dan analisis konstanta elastis. Metode atomistik menunjukkan bahwa struktur kristal yang berbentuk tetragonal dan kelompok ruang P4/mmm. Optimasi geometri dilakukan dengan menggunakan energy cutoff sebesar 300 eV terhadap struktur kristal yang berbentuk tetragonal dengan parameter kisi (a, b, c) adalah (10, 10, 1) dalam satuan Å. Analisis konstanta elastis menghasilkan besaran C_{ij} terdiri dari i adalah pola regangan secara masing-masing sebanyak 6 dan j adalah amplitudo sebanyak 6. C_{ij} berguna untuk menentukan konstanta elastis beserta jenisnya, antara lain modulus elastisitas, modulus bulk, modulus geser, kompresibilitas, dan rasio poisson serta berguna untuk menentukan kondisi stabilitas dari Fe₃Ni₂ dan Fe₆Ni₃Co.

.....Computational studies are studies that are determined from the calculation of the electronic structure of materials, such as Fe, Ni, and Co. The crystal structures in the form of Fe, Ni, and Co materials which are computed are Fe₃Ni₂ and Fe₆Ni₃Co. The Fe₆Ni₃Co structure obtained by replacing Ni in Fe₃Ni₂ with Co. This study was carried out using Density Functional Theory (DFT) through atomistic method, geometry optimization, and elastic constant analysis. Atomistic method shows that the crystal structure is tetragonal and the space group is P4/mmm. Geometry optimization was carried out using a cutoff energy of 300 eV for a tetragonal crystal structure with lattice parameters (a, b, c) of (10, 10, 1) in Å units. Analysis of the elastic constant produces the amount C_{ij} consist of i is the pattern of strain as many as 6 each and j is the amplitude of 6. C_{ij} is useful for determine the elastic constants and their types, including modulus of elasticity, bulk modulus, shear modulus, compressibility, and poisson's ratio as well useful to determine the stability conditions of Fe₃Ni₂ and Fe₆Ni₃Co.