

BAB I

PENDAHULUAN

I.1 Latar Belakang

Fisika zat padat merupakan sebuah studi yang mempelajari struktur dan sifat fisis dari benda (zat) padat. Secara umum, terdapat dua jenis zat padat yaitu kristal dan amorf. Kristal memiliki susunan atom yang teratur sedangkan amorf memiliki susunan antar atom yang tidak teratur. Sebagian besar teori dalam fisika zat padat terfokus pada kristal.[Jr07]

Salah satu sifat fisik yang penting pada benda padat adalah struktur kristalnya. Struktur kristal adalah suatu susunan oleh atom-atom yang identik dalam suatu kristal. Struktur kristal dibangun oleh sel unit, sekumpulan atom yang tersusun secara khusus, yang secara periodik berulang dalam tiga dimensi dalam suatu kisi (*lattice*). Panjang sel unit dalam segala arah adalah *lattice constant*, juga disebut *lattice parameter*. [Kit05]

Struktur kristal dapat diprediksi dengan cara menghitung energi total dari beberapa kumpulan atom menggunakan perhitungan metode teori fungsi kerapatan atau *Density Functional Theory* (DFT). Metode DFT digunakan karena metode ini adalah metode *ab initio* yang berarti tidak menggunakan pendekatan apapun [SS09]. Sehingga solusi dari metode DFT sangat bisa dipertanggungjawabkan.

Studi ini mempelajari formasi CuPd *alloy* yang terbentuk dari bulk Cu dan bulk Pd. Pemilihan CuPd *alloy* untuk mengetahui *bravais lattice* sesuai dalam pembentukan CuPd *alloy*. Semua perhitungan dalam studi ini berbasis *Density Functional Theory* (DFT) terimplementasikan di dalam perangkat lunak Quantum Espresso (QE).

I.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah studi ini adalah **bagaimana menentukan *bravais lattice* yang sesuai dalam pembentukan CuPd *alloy*.**

I.3 Tujuan

Tujuan studi ini adalah **mengevaluasi energi formasi CuPd *alloy* yang terbentuk dari *cubic crystal system* Cu dan Pd.**

I.4 Batasan Masalah

Untuk menyederhanakan masalah, studi ini mengambil batasan sebagai berikut.

1. Bulk Cu, bulk Pd, dan CuPd *alloy* masing - masing menggunakan variasi *lattice* *sc*, *lattice* *bcc*, dan *lattice* *fcc*.
2. Kalkulasi *Density Functional Theory* menggunakan basis set *plane wave* dengan fungsional *exchange-corelation* PBE (Purdeu-Burke-Ernzerhof).
3. *Pseudopotential* yang digunakan adalah Cu.pbe-dn-kjpaw_ps1.1.0.0.UPF untuk Tembaga dan Pd.pbe-n-kjpaw_ps1.1.0.0.UPF untuk Paladium.
4. Perhitungan keadaan dasar pada 0 K, sesuai dengan asumsi yang digunakan dalam *Density Functional Theory* (DFT).

I.5 Manfaat

Manfaat tugas akhir ini adalah :

1. Sebagai langkah awal untuk mempelajari struktur *bulk* dan model awal sederhana untuk mempelajari fisika zat padat.
2. Sarana untuk mengembangkan cara berpikir ilmiah dan menulis yang baik serta benar.