

Pemodelan Pengaruh Substitusi Sr Pada Pb Terhadap Sifat Mekanik Perovskite Manganite $\text{Nd}_{0,67}\text{Pb}_{0,33}\text{MnO}_3$ = Modeling the Effect of Sr Substitution in Pb on Properties Mechanical Perovskite Manganite $\text{Nd}_{0,67}\text{Pb}_{0,33}\text{MnO}_3$

Yulinar Cahyani, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920540801&lokasi=lokal>

Abstrak

Penelitian sifat mekanik dalam struktur perovskite manganite ($\text{Nd}_{0,67}\text{Pb}_{0,33}\text{MnO}_3$ (NPbMO) dan $\text{Nd}_{0,67}\text{Sr}_{0,33}\text{MnO}_3$ (NSMO)) menggunakan Density Functional Theory (DFT) dengan kode Cambridge Majelis Serial Total Energy Package (CASTEP). Pemodelan struktur menggunakan kelompok ruang kubik $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ (221) dan parameter kisi setiap struktur 3,78 Å, parameterisasi PBE-GGA dan pendekatan BFGS. Ketentuan pemodelan ini diterapkan pada semua struktur yaitu NdMnO_3 (NMO), PbMnO_3 (PMO), dan SrMnO_3 (SMO). Pada NPbMO, masing-masing NMO dan PMO memiliki energi cutoff 500 eV dan k-point $7 \times 7 \times 7$. Sedangkan pada NSMO, NMO memiliki energi cutoff 400 eV dan SMO memiliki energi cutoff 10 eV dengan nilai k-point yang sama yaitu $1 \times 1 \times 1$. Ketentuan diatas menghasilkan kenaikan parameter kisi dan volume sel yang berakibat pada kenaikan jari-jari atom, melemahnya gaya ikatan antar inti atom dan elektron sehingga mengurangi tingkat keelektronegatifan ion dan penurunan keelektronegatifan. Sifat mekanik menunjukkan karakteristik material NPbMO dan NSMO berupa kekakuan, ketahanan terhadap kemunduran, dan keuletan. Substitusi Sr menggantikan Pb pada Nd menunjukkan bahwa NSMO lebih memiliki karakteristik berupa titik elastisitas yang lebih tinggi, ketahanan terhadap kelahiran yang lebih rendah, dan tingkat keuletan yang lebih rendah dari NPbMO.

Investigasi sifat mekanik pada struktur manganit perovskit ($\text{Nd}_{0,67}\text{Pb}_{0,33}\text{MnO}_3$ (NPbMO) dan $\text{Nd}_{0,67}\text{Sr}_{0,33}\text{MnO}_3$ (NSMO)) menggunakan teori fungsional densitas (DFT) dengan kode Cambridge Majelis Serial Total Energy Package (CASTEP). Pemodelan struktur menggunakan kelompok ruang kubik $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ (221) dan parameter kisi masing-masing struktur sebesar 3,78 Å, parameterisasi PBE-GGA, dan pendekatan BFGS. Aturan pemodelan ini diterapkan pada semua struktur yaitu NdMnO_3 (NMO), PbMnO_3 (PMO), dan SrMnO_3 (SMO). Pada NPbMO, masing-masing NMO dan PMO memiliki energi cutoff sebesar 500 eV dan titik k sebesar $7 \times 7 \times 7$. Sedangkan pada NSMO, NMO memiliki cutoff energi sebesar 400 eV dan SMO memiliki cutoff energi sebesar 10 eV dengan nilai kpoint yang sama yaitu $1 \times 1 \times 1$. Ketentuan di atas menyebabkan peningkatan parameter kisi dan volume sel, yang meningkatkan jari-jari atom, melemahkan gaya ikatan antara inti atom dan elektron, sehingga mengurangi tingkat keelektronegatifan ion, dan mengurangi kesenjangan keelektronegatifan. Sifat mekanik menunjukkan karakteristik material NPbMO dan NSMO dalam hal kekakuan, ketahanan terhadap deformasi, dan keuletan.

Substitusi Sr dengan Pb pada Nd menunjukkan bahwa NSMO memiliki sifat elastisitas yang lebih tinggi, ketahanan deformasi yang lebih rendah, dan keuletan yang lebih rendah dibandingkan NPbMO.</p>