

# Pemodelan Pengaruh Subsitusi Sr Pada Pb Terhadap Sifat Mekanik Perovskite Manganite Nd<sub>0,67</sub>Pb<sub>0,33</sub>MnO<sub>3</sub> = Modeling the Effect of Sr Substitution in Pb on Properties Mechanical Perovskite Manganite Nd<sub>0,67</sub>Pb<sub>0,33</sub>MnO<sub>3</sub>

Yulinar Cahyani, author

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

---

## Abstrak

<p style="text-align: justify;"><font style="vertical-align: inherit;"><font style="vertical-align: inherit;">Penelitian sifat mekanik dalam struktur perovskite manganite (Nd<sub>0,67</sub>Pb<sub>0,33</sub>MnO<sub>3</sub> (NPbMO) dan Nd<sub>0,67</sub>Sr<sub>0,33</sub>MnO<sub>3</sub> (NSMO)) menggunakan Density Functional Theory (DFT) dengan kode Cambridge Majelis Serial Total Energy Package (CASTEP). </font><font style="vertical-align: inherit;">Pemodelan struktur menggunakan kelompok ruang kubik  $\bar{I}\bar{3}\bar{3}\bar{3}$  (221) dan parameter kisi setiap struktur 3,78 Å, parameterisasi PBE-GGA dan pendekatan BFGS. </font><font style="vertical-align: inherit;">Ketentuan pemodelan ini diterapkan pada semua struktur yaitu NdMnO<sub>3</sub> (NMO), PbMnO<sub>3</sub> (PMO), dan SrMnO<sub>3</sub> (SMO). </font><font style="vertical-align: inherit;">Pada NPbMO, masing-masing NMO dan PMO memiliki energi cutoff 500 eV dan k-point 7×7×7. Sedangkan pada NSMO, NMO memiliki energi cutoff 400 eV dan SMO memiliki energi cutoff 10 eV dengan nilai k-point yang sama yaitu 1 × 1 × 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. </font><font style="vertical-align: inherit;">Sifat mekanik menunjukkan karakteristik material NPbMO dan NSMO berupa kekakuan, ketahanan terhadap kemunduran, dan keuletan. </font><font style="vertical-align: inherit;">Subsitusi Sr menggantikan Pb pada Nd menunjukkan bahwa NSMO lebih memiliki karakteristik berupa tikat elastisitas yang lebih tinggi, ketahanan terhadap kelahiran yang lebih rendah, dan tingkat keuletan yang lebih rendah dari NPbMO.</font></font></p><hr /><p style="text-align: justify;"><font style="vertical-align: inherit;"><font style="vertical-align: inherit;">Investigasi sifat mekanik pada struktur manganit perovskit (Nd<sub>0,67</sub>Pb<sub>0,33</sub>MnO<sub>3</sub> (NPbMO) dan Nd<sub>0,67</sub>Sr<sub>0,33</sub>MnO<sub>3</sub> (NSMO)) menggunakan teori fungsional densitas (DFT) dengan kode Cambridge Majelis Serial Total Energy Package (CASTEP). </font><font style="vertical-align: inherit;">Pemodelan struktur menggunakan kelompok ruang kubik Pm  $\bar{I}\bar{3}m$  (221) dan parameter kisi masing-masing struktur sebesar 3,78 Å, parameterisasi PBE-GGA, dan pendekatan BFGS. </font><font style="vertical-align: inherit;">Aturan pemodelan ini diterapkan pada semua struktur yaitu NdMnO<sub>3</sub> (NMO), PbMnO<sub>3</sub> (PMO), dan SrMnO<sub>3</sub> (SMO). </font><font style="vertical-align: inherit;">Pada NPbMO, masing-masing NMO dan PMO memiliki energi cutoff sebesar 500 eV dan titik k sebesar 7×7×7. </font><font style="vertical-align: inherit;">Sedangkan pada NSMO, NMO memiliki cutoff energi sebesar 400 eV dan SMO memiliki cutoff energi sebesar 10 eV dengan nilai kpoint yang sama yaitu 1×1×1. </font><font style="vertical-align: inherit;">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. </font><font style="vertical-align: inherit;">Sifat mekanik menunjukkan karakteristik material NPbMO dan NSMO dalam hal kekakuan, ketahanan terhadap deformasi, dan keuletan.

</font><font style="vertical-align: inherit;">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.</font></font></p>