

Pengaruh Substitusi Unsur Divalen Terhadap Struktur dan Sifat Mekanik Perovskite Manganit $\text{Nd}_{0.67}\text{Sr}_{(0.33-x)}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ Menggunakan Permodelan Komputasi Density Functional Theory = The Effect of Divalent Substitution on Structural and Mechanical Properties of Perovskite Manganite $\text{Nd}_{0.67}\text{Sr}_{(0.33-x)}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ Using Density Functional Theory

Tasya Indah Juwita Sari, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920540862&lokasi=lokal>

Abstrak

Material dengan struktur perovskit manganit ini memiliki manfaat pada beberapa bidang seperti sel surya, sensor, baterai, laser, pressure induced emission, photovolcanics, dan thermoelectrict. Substitusi dengan menggunakan unsur divalent seperti Sr dan Ca pada manganit perovskite. Penelitian ini bertujuan untuk meninjau sifat mekanik pada material manganit perovskit NSMO dan NCMO menggunakan metode komputasi Density functional Theory (DFT) yang akan diimplementasikan menggunakan CASTEP dan juga dengan menggunakan konsep Rule of Mixture untuk membantu perhitungannya. Hasil Analisis yang diperoleh pada penelitian ini menunjukkan bahwa konstanta elastisitas pada NSMO dan NCMO memiliki nilai konstanta elastisitas yang sesuai dengan eksperimennya dan juga diketahui bahwa nilai konstanta elastisitas pada NCMO lebih kecil dibandingkan NSMO.

.....Materials containing manganite perovskite structure provide advantages in variety of fields such as solar cells, sensors, batteries, lasers, pressure induced emission, photovolcanics, and thermoelectric. With the substitution of divalent elements Sr and Ca in manganite perovskite, this study examines the mechanical properties of manganite perovskite NSMO and NCMO materials using the computational method based on Density Functional Theory (DFT), which will be implemented using CASTEP, as well as the Rule of Mixture concept for assisting the computation. The findings of this study reveal that the elastic constants in NSMO and NCMO have the values that are consistent with the experiment, and that the value of the elastic constants in NCMO is smaller than NSMO.