

Pengaruh Doping Unsur Barium Terhadap Struktur dan Sifat Mekanik Perovskite Manganite $\text{Nd}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ Menggunakan Density Functional Theory = Effect of Barium Doping on the Structure and Mechanical Properties of Perovskite Manganese $\text{Nd}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ using Density Functional Theory

Yarra Kartika Sari, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920575502&lokasi=lokal>

Abstrak

Abstrak

Penelitian sifat mekanik dalam struktur material perovskite manganite $\text{Nd}_{0,67}\text{Sr}_{0,33}\text{MnO}_3$ dan $\text{Nd}_{0,67}\text{Ba}_{0,33}\text{MnO}_3$ menggunakan metode teori fungsional densitas (DFT) dengan kode CASTEP untuk menghitung konstanta elastisitas material. Pemodelan struktur molekul dapat dilakukan menggunakan program seperti Materials Studio, Avogadro, atau VESTA. Pemodelan ini menggunakan parameter kisi masing-masing kelompok adalah 3,782 Å dan besar sudut masing-masing titik sel adalah 90°. Dengan parameterisasi Perdew-Burke-Ernzsh (PBE) dan Generalized Gradient Approximation (GGA). Dengan kelompok ruang kubik $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ (221). Penelitian menggunakan DFT dengan kode CASTEP bisa mendapatkan perhitungan *Rule of Mixture* untuk perhitungan konstanta elastisitas dengan hasil yang mendekati penelitian secara eksperimen. Secara keseluruhan hasil yang didapatkan material NBMO lebih besar dibandingkan material NSMO karena memang NBaMO sendiri memiliki kestabilan lebih tinggi dibandingkan NSMO.

The study of the mechanical properties in the structure of perovskite manganite materials $\text{Nd}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$ and $\text{Nd}_{0.67}\text{Ba}_{0.33}\text{MnO}_3$ used the functional theory of density (DFT) method with CASTEP code to calculate the elasticity constant of the material. Modeling of molecular structures can be done using programs such as Materials Studio, Avogadro, or VESTA. This modeling uses the grid parameter of each group is 3.782 Å and the angular magnitude of each cell point is 90°. With Perdew-Burke-Ernzsh (PBE) and Generalized Gradient Approximation (GGA) parameterization. With a cubic space group $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ (221). Researchers using DFT with CASTEP code can obtain *a Rule of Mixture* calculation for the calculation of elasticity constants with results that are close to experimental research. Overall, the results obtained by NBMO material are greater than NSMO materials because indeed NBaMO itself has higher stability than NSMO.