

Investigasi struktur elektronik, magnetik dan optimasi termoelektrik heavily-doped  $\text{Ca}_{0.5}\text{La}_{0.25}\text{Bi}_{0.25}\text{MnO}_3$  menggunakan metode komputasi DFT dan model restructured single parabolic band = Investigation of electronic and magnetic structures, and thermoelectric optimization of heavily-doped  $\text{Ca}_{0.5}\text{La}_{0.25}\text{Bi}_{0.25}\text{MnO}_3$  using DFT computation method and restructured single parabolic band model

Bambang Mulyo Raharjo, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20527446&lokasi=lokal>

---

Abstrak

Investigasi terhadap struktur elektronik, magnetik, dan sifat termoelektrik dari heavily-doped  $\text{Ca}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MnO}_3$  (CLMO) dan  $\text{Ca}_{0.5}\text{La}_{0.25}\text{Bi}_{0.25}\text{MnO}_3$  (CLBMO) dilakukan dengan metode komputasi density functional theory (DFT) dan transportasi Boltzmann. Sedangkan optimasi termoelektrik dari kedua kompon diperoleh dengan menggunakan model restructured single parabolic band. Baik CLMO dan CLBMO dengan struktur kristal orthorhombic (Pnma), menunjukkan keadaan paling stabil pada konfigurasi feromagnetik dengan energi total minimum paling rendah. Doping Bi pada CLBMO mereduksi sudut ikatan Mn–O–Mn yang menyebabkan distorsi kisi dan membentuk hibridisasi Bi 6s – O 2p yang berkompetisi dengan hibridisasi Mn 3d – O 2p. Mekanisme tersebut secara simultan menurunkan konduktivitas listrik dan konduktivitas termal dari CLBMO. CLBMO menunjukkan optimasi power factor masing-masing sebesar 49% dan 69% pada suhu 300 K dan 800 K. Sedangkan CLMO hanya memberikan optimasi sebesar 13% dan 30% pada suhu yang sama. Kedua kompon memiliki konduktivitas termal fonon tiga sampai empat orde lebih kecil dari konduktivitas termal elektroniknya. Dengan demikian perhitungan figure of merit, ZT, hanya didasarkan pada mekanisme transport pembawa muatan, dan tidak melibatkan transport fonon yang menjadikan perhitungan lebih rumit. Nilai ZT dikoreksi dengan melibatkan rasio waktu relaksasi konduktivitas listrik terhadap waktu relaksasi konduktivitas termal elektronik,  $t_s/t_{ke}$ , yang berbanding terbalik dengan rasio bilangan Lorenz terhadap degenarate limit,  $L/L_0$ .

.....Investigations on the electronic structure, magnetic, and thermoelectric properties of heavily-doped  $\text{Ca}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MnO}_3$  (CLMO) and  $\text{Ca}_{0.5}\text{La}_{0.25}\text{Bi}_{0.25}\text{MnO}_3$  (CLBMO) are carried out using density functional theory (DFT) computational methods and Boltzmann transport. Meanwhile, the thermoelectric optimization of the two compounds is obtained by using a restructured single parabolic band model. Both CLMO and CLBMO with the orthorhombic crystal structure (Pnma), show the most stable state in the ferromagnetic configuration with the lowest minimum total energy. Bi-doping in CLBMO reduces the Mn–O–Mn bond angle which causes lattice distortion and forms Bi 6s – O 2p hybridization which competes with Mn 3d – O 2p hybridization. This mechanism simultaneously reduces the electrical conductivity and thermal conductivity of CLBMO. CLBMO shows optimization of power factors of 49% and 69% at temperatures of 300 K and 800 K, respectively. While CLMO only provides optimization of 13% and 30% at the same temperature. Both compounds have phonon thermal conductivity two to three orders of magnitude lower than their electronic thermal conductivity. Thus the calculation of the figure of merit, ZT, is only based on the mechanism of charge carrier transport and does not involve phonon transport which leads to a more complicated calculation. The ZT value is corrected by involving the ratio of the relaxation time of the electrical conductivity to the relaxation time of the electronic thermal conductivity,  $t_s/t_{ke}$ , which

is inversely proportional to the ratio of the Lorenz number to the degenerate limit,  $L/L_0$ .