

Thesis

**PERUBAHAN FASE MAGNETIK SPIN POLIHEDRAL
PADA KISI 2D DENGAN CACAT KRISTAL**

SRI YUNITA

H032181003



**PROGRAM STUDI MAGISTER
DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR
2022**

**PERUBAHAN FASE MAGNETIK SPIN POLIHEDRAL
PADA KISI 2D DENGAN CACAT KRISTAL**

TESIS

Sebagai salah satu syarat untuk mencapai Magister

**Program Studi
Magister Fisika**

Disusun dan diajukan oleh :

SRI YUNITA

Kepada

**PROGRAM STUDI MAGISTER
DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR
2022**

LEMBAR PENGESAHAN TESIS

**PERUBAHAN FASE MAGNETIK SPIN POLIHEDRAL PADA KISI 2D
DENGAN CACAT KRISTAL**

Disusun dan diajukan oleh

**SRI YUNITA
H032181003**


Telah dipertahankan di depan Panitia Ujian yang dibentuk dalam rangka penyelesaian studi program Magister Program Studi Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Hasanuddin

Pada tanggal 26 Desember 2022

Dan dinyatakan telah memenuhi syarat kelulusan

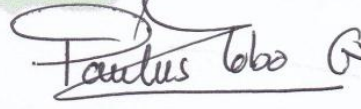
Menyetujui,

Pembimbing Utama,



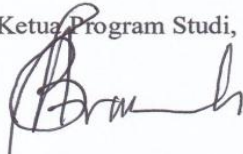
Prof. Dr. Tasrief Surungan, M.Sc
NIP. 19670222 199203 1 000

Pembimbing Pendamping,



Prof. Dr. Paulus Lobo Gareso, M.Sc
NIP. 19650305 1991031 000

Ketua Program Studi,



Dr. Ir. Bidayatul Armynah, MT.
NIP. 19630830 198903 2 001

Dekan Fakultas,



Dr. Eng. Amruddin, M.Si.
NIP. 19720515 199702 1 002

PERNYATAAN KEASLIAN

Yang bertandatangan di bawah ini

Nama : Sri Yunita
NIM : H032181003
Program Studi : Fisika
Jenjang : S2

Menyatakan dengan ini bahwa karya tulis saya berjudul

PERUBAHAN FASE MAGNETIK SPIN POLIHEDRAL PADA KISI 2D DENGAN CACAT KRISTAL

Adalah karya tulisan saya sendiri, bukan merupakan pengambil alihan tulisan orang lain dan bahwa tesis yang saya tulis ini benar-benar merupakan hasil karya saya sendiri.

Apabila dikemudian hari terbukti atau dapat dibuktikan bahwa sebagian atau keseluruhan isi tesis ini hasil karya orang lain, maka saya bersedia menerima sanksi atas perbuatan tersebut.

Makassar, 28 Desember 2022

Yang menyatakan



SRI YUNITA

PRAKATA

Salam sejahtera,

Terpujilah Tuhan Yesus Kristus, Sang pemilik kehidupan karena atas cinta kasih dan perkenaanNya, penulis dapat menyelesaikan tesis ini sebagai salah satu syarat kelulusan pada program magister jurusan Fisika Universitas Hasauddin. Tesis ini berjudul “Perubahan Fase Magnetik Spin Polihedral pada Kisi 2D dengan Cacat Kristal”.

Dalam perjalanan masa studi dan penyusunan tesis, penulis telah banyak dibantu oleh berbagai pihak, baik bantuan moril maupun material, doa dan perhatian serta berbagai kemudahan fasilitas yang sangat mendukung dalam penyelesaian studi.

Rasa hormat dan ucapan terimakasih penulis sampaikan kepada komisi penasehat : Bapak **Prof. Dr. Tasrief Surungan, M.Sc** selaku pembimbing utama, dan Bapak **Prof. Dr. Paulus Lobo Gareso, M.Sc** selaku pembimbing pendamping, yang dengan penuh kesabaran senantiasa mendampingi, membimbing dan mengarahkan penulis dalam proses penyelesaian studi

Terimakasih kepada tim penguji **Prof. Dr. Dahlang Tahir, M.Si, Prof. Dr. Syamsir Dewang, M.Eng.Sc**, dan **Prof. Dr. Wira Bahari Nurdin** atas dedikasi waktu dan pemikiran dalam memberikan masukan serta arahan dalam penyempurnaan tesis ini.

Ucapan terimakasih kepada segenap Dosen pada jurusan Fisika FMIPA Unhas atas ilmu yang telah diberikan kepada penulis. Dan terimakasih kepada segenap staff akademik jurusan dan fakultas serta rekan-rekan mahasiswa yang senantiasa membantu penulis dalam proses studi yang telah dilewati.

Rasa syukur atas keberadaan orang tua ayahanda **Yunus Siang** dan Ibu **Elis Baru Massora**, ibu mertua **Riasta Mirring**, suami tercinta **Daud Rianto** atas doa dan perhatiannya serta motivasi yang senantiasa diberikan kepada penulis. Kedua anak terkasih **Riyun** dan **Riyan** sebagai penyemangat dalam menjalani proses studi ini.

Penulis menyadari bahwa dalam tulisan ini ada terdapat kekurangan, oleh karena itu dengan kerendahan hati penulis memohon koreksi dan masukan kepada setiap pembaca demi untuk perbaikan karya kedepan yang lebih baik. Penulis berharap bahwa karya ini dapat memberikan manfaat kepada pembaca.

Makassar, 28 Desember 2022

Sri Yunita

ABSTRAK

Sifat kritis model magnetik spin Dodecahedron pada kisi 2D dengan cacat Kristal telah diteliti dengan menggunakan metode simulasi Monte Carlo. Spin dodecahedron adalah salah satu tipe spin polyhedral yang merupakan padanan diskrit dari spin Heisenberg. Algoritma Wolff digunakan untuk menganalisis perubahan fase sebagai efek dari adanya cacat kristal dalam bentuk cacat interaksi (*bond dilution*) yang dinyatakan dengan konsentrasi interaksi (C) yaitu $C = 1.0, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6,$ dan 0.55 , dimana $C=1.0$ bersesuaian dengan system tanpa cacat interaksi. Adapun ukuran kisi bujursangkar yang digunakan adalah $L = 16, 32, 64$ dan 128 . Besaran fisis yang diamati adalah panas jenis, magnetisasi dan perbandingan korelasi (correlation ratio). Keberadaan transisi fase dapat diamati dari hubungan antara rasio korelasi terhadap temperature. Diagram fase digambarkan dengan memplot nilai temperature kritis terhadap masing-masing konsentrasi (C).

Kata Kunci : spin dodecahedron, cacat interaksi, Monte Carlo, algoritma Wolff,

ABSTRACT

The critical properties of dodecahedron spin model on square lattice with diluted bonds have been studied using Monte Carlo simulation. Dodecahedron spin model is a polyhedral spin which is discrete counterpart of the Heisenberg spin. Wolff's algorithm is used to obtain data in order to probe the phase transition due to the presence of bond dilution. We assign bond density (concentration) as $C = 1.0, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6,$ and 0.55 where $C = 1.0$ corresponds to a non-diluted case. The lattice system size simulated are $L = 16, 32, 64$ and 128 . We calculate the specific heat, magnetization, and correlation ratio. The existence of phase transition can be seen by correlation between correlation ratio and temperature. Phase diagram is presented by a plot of critical temperature with respect to each concentration.

Keyword : dodecahedron spin model, bond dilution, Monte Carlo, Wolff algorithm

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
LEMBAR PENGESAHAN TESIS	iii
PERNYATAAN KEASLIAN	iv
PRAKATA	v
ABSTRAK	vii
ABSTRACT	viii
DAFTAR ISI	ix
BAB I PENDAHULUAN	
A. Latar Belakang	1
B. Tujuan Penelitian	4
C. Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
A. Transisi Fase	5
B. Magnetisasi Spontan	8
C. Model Ising	11
D. Model Spin Dodecahedron	12
E. Metode Monte Carlo	13

BAB III METODE PENELITIAN

A. Alat dan Bahan.....	18
B. Model	18
C. Prosedur Simulasi	20
D. Diagram Alir Penelitian	22
E. Bagan Prosedur Simulasi	23

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

A. Sifat Termodinamik	25
A.1 Energi	25
A.2 Specific Heat	26
B. Sifat Magnetik.....	27
B.1 Magnetisasi.....	27
B.2 Fungsi Korelasi	29
B.3 Estimasi Temperatur Kritis dan Diagram Fase	31

BAB V PENUTUP

A. Kesimpulan	33
B. Saran	33

DAFTAR PUSTAKA

LAMPIRAN-LAMPIRAN

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Pengembangan bahan dasar teknologi seperti superkonduktor dan bahan magnet secara berkelanjutan telah menghasilkan banyak penemuan baru yang mempermudah aktivitas manusia. Pengembangan material sebagai bahan dasar teknologi tidak terlepas dari penelitian dasar dari material yang terdapat di alam. Tidak dapat dipungkiri bahwa terdapat material tertentu yang mengalami perubahan fase, dan menjadi material baru dengan sifat baru pula. Oleh karena itu, studi perubahan fase merupakan kajian penting dalam bidang fisika.

Perubahan fase adalah fenomena alam yang umum terjadi yang memerlukan peninjauan, baik secara teoretik maupun eksperimen (Sachdev, 2001). Perubahan wujud zat (padat ke cair, gas ke cair, atau dari padat ke gas dan sebaliknya) merupakan contoh perubahan fase yang terjadi dalam kehidupan sehari-hari. Studi perubahan fase dapat diaplikasikan dalam berbagai bidang, diantaranya fisika partikel, fisika material, fisika zat padat, dan lain-lain. Perubahan fase sangat berkaitan dengan fenomena kerusakan simetri sistem (Surungan dkk, 2013). Penerapan teori perubahan fase dalam bahan magnetik mampu menjelaskan adanya material seperti superkonduktor dan feromagnet. Bahan ini sangat berperan dalam perkembangan teknologi.

Salah satu contoh perubahan fase bahan magnetik adalah magnetisasi spontan, yang terjadi apabila sistem feromagnetik didinginkan hingga temperatur kritis (temperature *Curie*). Pada fase magnetik, spin-spin berada pada keadaan teratur sebagai akibat dari berkurangnya fluktuasi termal yaitu penurunan suhu. Fase keteraturan ini dipengaruhi (salah satunya) oleh interaksi antara spin. Spin yang menempati titik kisi, akan berinteraksi secara lebih kuat dengan spin tetangga terdekatnya (*nearest-neighbors*). Interaksi antara spin dapat ditambahkan (*rewired*) maupun dikurangi (*diluted bonds*) [T.Surungan, 2018].

Interaksi antara spin dapat dipengaruhi oleh adanya keacakan (*randomness*), yaitu kehadiran interaksi feromagnetik dan antiferomagnetik. Studi tentang keacakan (*randomness*) menjadi salah satu kajian penting dalam perubahan fase sebagai dampak dari adanya cacat atau ketidakmurnian dalam material. Kriteria Harris dapat memprediksi signifikansi kehadiran keacakan dalam mempengaruhi sifat kritis material. Kriteria ini menyatakan bahwa jika eksponen panas jenis dari sistem murni mengalami perubahan fase orde kedua dan bernilai positif, maka sifat kritis sistem akan dipengaruhi oleh keacakan (Harris, 1974).

Fenomena magnetisasi spontan dapat dijelaskan secara teoritik menggunakan model magnetik sederhana, yaitu model Ising (Ising, 1925). Model ini menggambarkan adanya variable diskret (momen magnetik spin), yang mana spin-spin tersebut menempati titik kisi. Model Ising menetapkan spin dapat bernilai +1 atau -1. Model Ising pada kisi 2D dengan kasus sederhana adalah

spin-spin yang dapat berinteraksi dengan tetangga terdekatnya. Model Ising juga dapat menjelaskan bagaimana pengaruh keacakan (randomness) yang terjadi dalam transisi fase dalam kaitannya dengan kriteria Harris.

Penelitian sebelumnya tentang model Ising dilakukan oleh Ridha dkk pada kisi 2 dimensi (Ridha dkk, 2018) yang memperlihatkan adanya pengaruh keacakan (cacat kristal) terhadap perubahan fase untuk model feromagnetik. Pada penelitian ini akan dikaji pengaruh keacakan untuk model magnetik spin polyhedral pada kisi 2D dengan menggunakan algoritma Wolff dari metode Monte Carlo. Disini akan dikaji model spin *dodecahedron* yaitu salah satu model spin diskrit dari grup spin polyhedral. Spin tersebut dimodelkan menempati kisi bujursangkar (2D) dengan spin-spin yang saling berinteraksi seperti halnya pada model spin Ising. Dengan menerapkan beberapa nilai konsentrasi cacat kristal (C) pada berbagai ukuran kisi ($L = 16, 32, 64, \text{ dan } 128$), akan dihitung sejumlah parameter antara lain panas jenis (*specific heat*), magnetisasi, fungsi korelasi dan rasionya, serta temperatur kritis. Diagram fasa diplot berdasarkan nilai temperatur kritis T_c untuk setiap nilai konsentrasi cacat kristal (C).

1.2 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah :

1. Menemu-kenali keberadaan transisi fase model magnetik spin polyhedral pada kisi bujursangkar (2D) yang memiliki cacat interaksi (*bond dilutions*).
2. Memperoleh diagram fase model magnetik spin polyhedral pada kisi 2D, yaitu plot antara temperatur kritis (T_c) terhadap variasi cacat interaksi.

1.3 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat menemukenali perubahan fase model magnetik spin polyhedral, pada kisi 2D dengan cacat kristal. Kebaharuan (novelty) dari penelitian ini adalah perolehan diagram fase model spin polyhedral pada kisi 2D dengan cacat kristal. Selain diagram fase, diperoleh pula nilai eksponen kritis untuk masing-masing parameter konsentrasi (keacakan) yang ditinjau.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

A. Transisi Fase

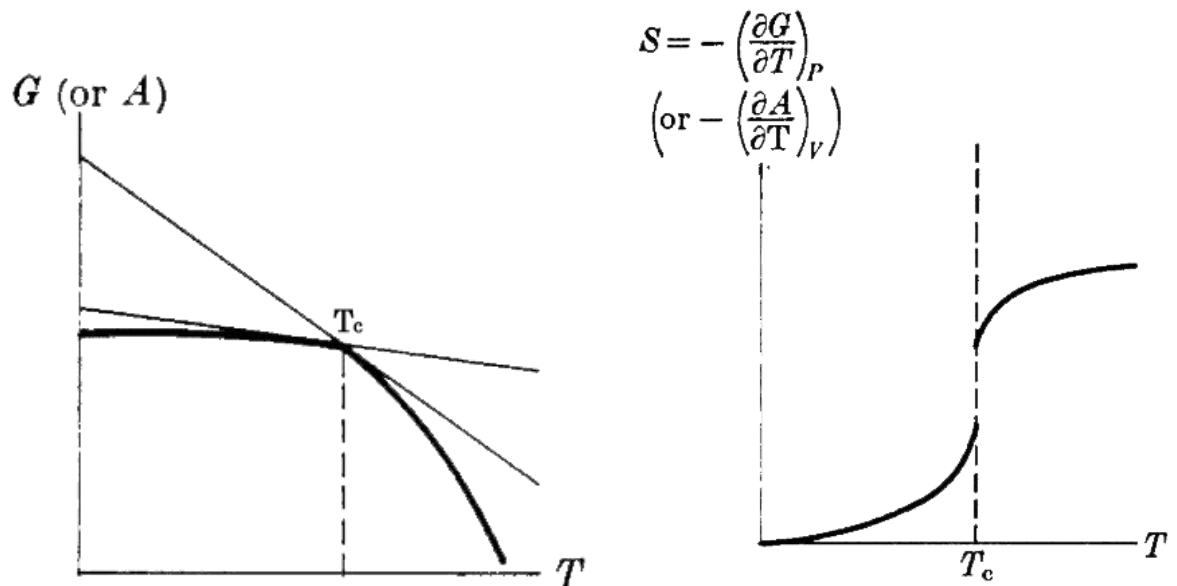
Transisi fase (phase transition) secara umum adalah terjadinya perubahan wujud zat. Transisi fase melibatkan perubahan pada struktur dan sifat fisis bahan ketika sebuah variabel luar seperti suhu dan tekanan diubah secara kontinu. Transisi fase berkaitan dengan kerusakan simetri sistem (Landau, 1965) Pada transisi fase akibat fluktuasi termal, pada temperatur tinggi sistem akan berada pada derajat simetri tinggi karena semua ruang konfigurasi dapat terakses dengan mudah. Pada suhu rendah fluktuasi termal akan berkurang sehingga sistem berada pada keadaan teratur (Ehrenfest, 1907). Sebuah sistem biasanya digambarkan oleh Hamiltonian, dan terjadinya transisi fase akan mempengaruhi Hamiltonian sistem tersebut.

Ketika kondisi makroskopik sistem berubah, misalnya tekanan dinaikkan atau suhu diturunkan atau adanya penerapan gaya luar, mengakibatkan satu atau dua elemen simetri akan menghilang. Hal ini merupakan gejala rusaknya simetri sistem. Sebagai contoh pada sebuah sistem magnetik, ketika terjadi magnetisasi spontan, maka simetri arah pada sistem magnetik mengalami kerusakan. Pada suhu di atas temperatur kritis (suhu *Curie*) spin-spin tidak mengarah pada arah tertentu sehingga magnetisasi nol. Ketika suhu diturunkan dibawah suhu *Curie*, magnetisasi spontan terjadi ditandai dengan spin-spin mengarah ke satu arah.

Transisi fase dapat terbagi atas 2 jenis yaitu transisi fase orde pertama dan transisi fase orde kedua. Penggolongan ini berdasarkan sifat kontinuitas energi dalam sistem.

1. Transisi Fase Orde 1

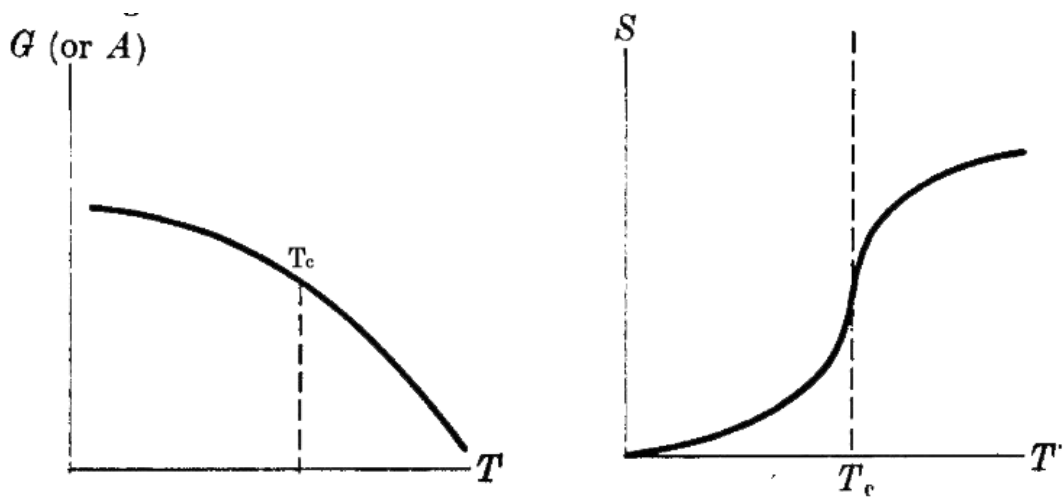
Transisi fase orde pertama adalah transisi yang melibatkan kalor laten. Kalor laten adalah kalor yang diserap atau dilepas selama perubahan. Salah satu contoh perubahan fase orde pertama adalah perubahan zat cair menjadi padat, yang ditandai dengan keberadaan kalor laten dan ko-eksistensi (co-existence) antara dua fase selama proses perubahan (Surungan, 2003). Selain itu, pada transisi fase orde pertama turunan pertama energi bebas (entropi) terhadap temperatur mengalami diskontinuitas.



Gambar 1. Perubahan Fase Orde Pertama (Stanley, 1971)

2. Transisi Fase Orde 2

Transisi fase orde kedua ditandai dengan tidak adanya kalor laten, dan turunan pertama energi bebas terjadi secara kontinu. Sebagai contoh perubahan fase orde kedua adalah magnetisasi spontan, transisi superkonduktor dan kondensasi dalam sistem gas liquid. Berdasarkan teori Landau, pada transisi fase orde ke 2, parameter keteraturan (order parameter) digunakan untuk menyatakan fungsi dari energi bebas. Magnetisasi (M) adalah parameter keteraturan dalam sistem kemagnetan (Toda dkk, 1992).



Gambar 2. Perubahan fase orde kedua (Stanley, 1971)

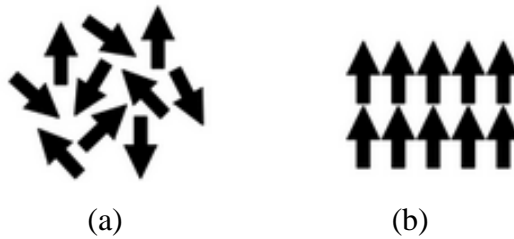
B. Magnetisasi Spontan

Bahan magnet adalah suatu bahan yang memiliki sifat kemagnetan dalam komponen pembentuknya. Sifat kemagnetan suatu bahan dipengaruhi oleh adanya medan magnet. Suatu bahan yang tidak memerlukan energi luar untuk memunculkan sifat kemagnetannya disebut magnet tetap, sedangkan magnet tidak tetap bergantung pada medan magnet luar untuk menghasilkan medan magnet bahan tersebut. Berdasarkan sifatnya terhadap pengaruh kemagnetan, bahan magnet diklasifikasikan menjadi diamagnetik, ferromagnetik, paramagnetik, antiferromagnetik dan ferrimagnetik.

Diamagnetik adalah jenis bahan yang tidak memiliki momen magnet permanen, sehingga apabila diberi medan magnet luar sedemikian rupa, maka momen magnet bahan akan melawan medan magnet luar tersebut (Stancil & Prabhakar, 2009). Sifat bahan diamagnetik ditemukan oleh Faraday pada tahun 1846 melalui sekeping Bismuth yang ditolak oleh kedua kutub magnet. Contoh bahan diamagnetik adalah perak, tembaga, dan bismuth.

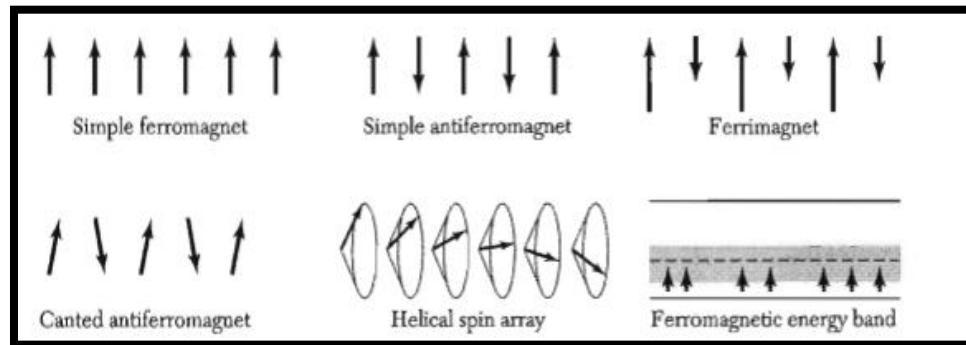
Paramagnetik adalah bahan magnet yang apabila dikenakan medan magnet luar, maka momen magnet akan berusaha mensejajarkan diri dengan medan magnet luar tersebut. Respon terhadap medan magnet yang diterapkan ini positif dan dikenal sebagai suseptibilitas magnetik (Ibach, Luth. 2009). Bahan paramagnetik kehilangan sifat magnetiknya ketika medan magnet luar tidak ada, dan bersifat magnetik ketika medan magnet diterapkan. Pada keadaan tanpa medan magnet, material memiliki momen magnetik yang tidak teratur yaitu momen magnet tidak simetris dan tidak

sejajar. Ketika medan magnet hadir, momen magnet akan disejajarkan dengan medan magnet yang diterapkan (Levy, Robert A. 1968). Contoh bahan paramagnetik adalah magnesium (Mg) dan lithium (Li).



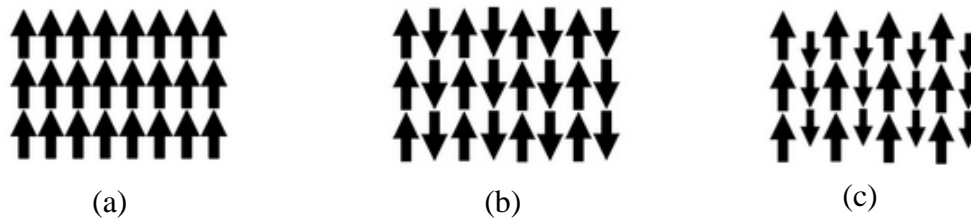
Gambar 3. Arah momen magnet bahan paramagnetik (a) sebelum dan (b) setelah diberi medan magnet luar

Ferromagnetik merupakan bahan yang memiliki nilai suseptibilitas magnetik positif sangat tinggi. Magnetisasi spontan yang terjadi pada bahan ferromagnetik menyebabkan sifat kemagnetannya sangat kuat walaupun medan magnet luar sudah tidak ada. Dibawah temperatur Curie, atom-atom sejajar menyebabkan magnetisasi spontan sehingga bahan bersifat ferromagnetik. Diatas suhu Curie, material bersifat paramagnetik karena atom kehilangan momen magnetiknya ketika material mengalami transisi fase (Cusack, 1958).



Gambar 4. Susunan keteraturan spin-spin electron (Kittel, 2005).

Bahan ferromagnetik memiliki momen magnet yang sejajar. Apabila momen magnetnya saling berlawanan, maka disebut antiferromagnet atau ferrimagnet. Pada bahan antiferromagnet momen magnet yang berdekatan sama besar, sedangkan pada bahan ferrimagnet, besar momen magnet yang berdekatan berbeda.



Gambar 5. Arah momen magnet bahan
 (a) Ferromagnetik
 (b) Antiferromagnetik
 (c) Ferrimagnetik

Berdasarkan pengelompokan bahan magnet diatas, dapat terlihat bahwa momen magnet sangat mempengaruhi jenis bahan magnet. Dan momen magnet itu sendiri juga dipengaruhi oleh adanya konfigurasi spin, dimana ketika ada pengaruh medan magnet luar, maka konfigurasi spin akan terganggu.

Salah satu parameter atau besaran fisis bahan magnet yang penting dalam magnetisasi spontan adalah temperatur Curie (T_c) yaitu temperatur kritis terjadinya perubahan fase ferromagnetik menjadi paramagnetik suatu bahan padat akibat pemanasan, dan dapat diamati dengan terlepasnya suatu bahan ferromagnetik dari magnet permanen (Okimustava, 2009). Pierre Curie dalam penelitiannya menunjukkan hilangnya sifat magnetik suatu bahan pada suhu kritis. Temperatur

diatas tempertur Curie (T_C) adalah keadaan dimana magnetisasi spontan lenyap. Ini memisahkan fase paramagnetik $T > T_c$ dari fase feromagnetik $T < T_c$ (Kittel, 2005).

C. Model Ising

Model Ising adalah model magnetik sederhana yang mampu menjelaskan adanya perubahan fase pada bahan magnet. Model Ising diperkenalkan oleh W. Lenz pada Tahun 1920, dan diselesaikan oleh Ising pada Tahun 1925, untuk kasus 1D dimana tidak ditemukan keberadaan perubahan fase. Berbeda dengan kasus 1D, model Ising 2D menunjukkan keberadaan transisi fase. Model Ising 2D dapat menunjukkan semua fenomena yang khas pada sistem magnetik pada daerah sekitar suhu Curie. Oleh karenanya, model Ising 2D menjadi pondasi untuk pemahaman teoritis tentang transisi fase bahan feromagnetik (Barry and Tsun, 2014).

Karakteristik model Ising dapat dikenali dari keberadaan variabel diskrit yaitu momen magnetik spin, yang nilainya $+1$ (*up*) atau -1 (*down*) (Nishimori, 2001). Spin-spin tersebut menempati titik kisi dan diasumsikan hanya berinteraksi dengan tetangga terdekat (*nearest-neighbors*). Sehingga dengan asumsi tersebut model Ising dapat memprediksi perilaku /sifat kritis suatu sistem magnetik (Bertoldi, Bringa and Miranda, 2012).

Dalam interaksi spin, spin terdekat yang searah memiliki energi lebih rendah dari pada yang tidak searah oleh karena sistem cenderung ke energi terendah, akan tetapi kenaikan suhu mengganggu kecenderungan ini sehingga menciptakan kemungkinan

fase struktural yang berbeda. Model ini memungkinkan identifikasi transisi fase sebagai model realistik (sesuai kenyataan) yang disederhanakan. Model Ising pada kisi persegi (2D) adalah salah satu model statistik paling sederhana yang menunjukkan keberadaan transisi fase (Gallavotti, 1999).

Interaksi antara spin terdekat dalam sistem digambarkan melalui Hamiltonian berikut :

$$H = -J \sum_{(i,j)} S_i S_j \quad 2.1$$

dimana J adalah representasi interaksi coupling antar spin, S_i adalah spin ke- i yang ditinjau, dan S_j adalah spin tetangga. J dapat bernilai negatif atau positif, yang masing-masing bersesuaian dengan sistem ferromagnet dan antiferromagnet.

D. Model Spin Dodecahedron

Polyhedron adalah gabungan dari sejumlah daerah segibanyak sedemikian, sehingga setiap sisi dari suatu daerah segibanyak merupakan sebuah sisi dari tepat sebuah segibanyak yang lain. Simetri *polyhedron* untuk model spin diperoleh dengan membagi sama besar sudut ruang (solid angle) 4π dari struktur bola. Terdapat lima tipe *polyhedron* regular yaitu tetrahedron, oktahedron, heksahedron, ikosahedron dan dodekahedron.

<i>Model</i>	<i>Vertices</i>	<i>Faces</i>	<i>Edges</i>	<i>Group Symmetry</i>
<i>Tetrahedron</i>	4	4	6	S_4
<i>Octahedron</i>	6	8	12	$O_h = S_4 \times C_2$
<i>Hexahedron (cube)</i>	8	6	12	O_h
<i>Icosahedron</i>	12	20	30	$A_5 \times C_2$
<i>Dodecahedron</i>	20	12	30	$A_5 \times C_2$

Tabel 1. Karakteristik *polyhedron* regular.

Dodekahedron adalah salah satu dari lima struktur regular dari bagian simetri *polyhedral*. Sebab itu, model spin dodekahedron adalah padanan diskrit model Heisenberg. Orientasi spin polihedron mengarah ke sudut-sudut setiap polihedron yang bersesuaian, dan spin tinjauan berada pada pusat polihedron. Penelitian sebelumnya telah dilakukan oleh Surungan dkk (2017) yang mengkaji model spin *polyhedral* pada kisi persegi (*square lattice*) untuk bahan feromagnetik tanpa cacat kristal, sementara itu Rahmat dkk (2021) meneliti model spin *polyhedral* dengan cacat kristal menggunakan algoritma *two-size PCC* dari metode Monte Carlo [unpublished].

E. Metode Monte Carlo

Metode Monte Carlo adalah algoritma komputasi yang banyak digunakan untuk simulasi numerik yang mengandalkan pengambilan sampel seara acak (*random walk*). Konsep yang mendasarinya adalah menggunakan keacakan untuk memecahkan masalah. Metode Monte Carlo terutama digunakan dalam optimasi, integrasi numerik, dan untuk distribusi probabilitas (Kroese, 2014).

Pada prinsipnya metode Monte Carlo dapat digunakan untuk memecahkan masalah yang memiliki interpretasi probabilistik. Berdasarkan hukum bilangan besar, integral yang dijelaskan oleh nilai harapan dari beberapa variabel acak dapat didekati dengan mengambil rata-rata empiris (rata-rata sampel) dari sampel independen. Ide utamanya adalah untuk memperoleh rantai Markov (Markov Chain); caranya melalui distribusi probabilitas stationer yang ditentukan. Artinya, dalam batasannya, sampel yang dihasilkan melalui metode MC akan menjadi sampel dari distribusi (target) yang diinginkan.

Simulasi Monte Carlo adalah metode fisika statistik yang mencuplik sejumlah keadaan mikroskopik yang sesuai dengan temperatur yang ditinjau. Keadaan-keadaan mikro dipilih menggunakan algoritma tertentu. Algoritma yang paling sering digunakan adalah algoritma Metropolis, Wang Landau dan Algoritma Wolff.

D.1 Algoritma Wang-Landau

Algoritma Wang-Landau sesuai dengan nama penemunya (F. Wang dan D. P. Landau) digunakan untuk memperoleh dan menganalisis rapat keadaan suatu sistem. Keunggulan algoritma Wang Landau adalah dimungkinkannya perolehan nilai rerata termal besaran fisis pada temperatur sembarang. Ide dasar algoritma ini adalah perolehan rapat energi $g(E)$ (*density of states = DOS*) yang akan digunakan dalam perhitungan rerata termal Q . Aspek penting dari algoritma Wang Landau adalah untuk mempercepat dinamika *randomwalk* sehingga DOS dapat dievaluasi secara

efisien dan tepat. Rapat energi $g(E)$ dihitung melalui iterasi dengan nilai awal $g(E)=1$ untuk semua keadaan. Probabilitas transisi dinyatakan dengan

$$P(E \rightarrow E') = \min \left[1, \frac{g(E)}{g(E')} \right] \quad (2.2)$$

dimana $g(E)$ adalah DOS untuk keadaan E . Dengan nilai awal $g(E)=1$ untuk semua keadaan. DOS kemudian dievaluasi melalui iterasi *random walk* dan nilai eksaknya diperoleh ketika histogram $h(E)$ mencapai syarat rata (*flatness*), yaitu rata-rata histogram tidak kurang dari nilai tertentu, misalnya 0,80. Nilai $g(E)$ (DOS) dan $h(E)$ diperbarui setiap saat melalui hubungan

$$\ln g(E_i) \rightarrow \ln g(E_i) + f_i \quad (2.3)$$

$$h(E_i) \rightarrow h(E_i) + 1 \quad (2.4)$$

dimana f_i merupakan parameter modifikasi yang secara bertahap direduksi menjadi nol ketika DOS mencapai keadaan konvergen.

Rerata termal dari besaran fisis (Q) didapatkan melalui hubungan berikut

$$\langle Q \rangle_\beta = \frac{\int dE g(E) Q(E) e^{-\beta E}}{\int dE g(E) e^{-\beta E}} \quad (2.5)$$

dimana $\beta = 1/kT$, k merupakan konstanta Boltzman dan T adalah temperatur.

D.2 Algoritma Metropolis

Algoritma Metropolis merupakan teknik MC yang paling umum dan mudah diterapkan. Aplikasi untuk model magnetik, kita misalkan sebuah kisi dengan N titik kisi, yang masing masing titik kisi terisi oleh spin Ising, dengan demikian akan

terdapat 2^N konfigurasi. Masing-masing konfigurasi tersebut akan berkontribusi pada sifat makroskopik sistem, misalnya besaran rerata termal Q pada temperatur T dinyatakan

$$\langle Q \rangle_T = \sum_{i=1}^{2^N} Q_i p \quad 2.6$$

dengan Q_i adalah nilai besaran pada konfigurasi ke- i , p_i adalah probabilitas Gibbs bagi sistem untuk berada dalam konfigurasi ke- i yang dinyatakan sebagai

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}; \quad Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad 2.7$$

dengan E_i dan $\beta (= 1/kT)$ masing-masing adalah energi konfigurasi ke- i dan temperatur invers, Z adalah fungsi partisi.

Dalam menghitung persamaan 2.7 dibutuhkan memori komputer yang sangat besar dan waktu komputasi yang cukup lama. Sehingga, untuk menghindari hal ini diperlukan teknik yang tepat untuk mencuplik sejumlah keadaan mikro (*microstates*) dari kumpulan semua keadaan mikro (microstates); dimana diambil hanya yang mengalami keadaan setimbang dari sistem pada temperatur T . Metoda ini pertama kali diperkenalkan oleh Nicholas Metropolis (Metropolis, 1953); kini dikenal sebagai algoritma Metropolis.

D.3 Algoritma Wolff

Algoritma Wolff (sesuai nama penemunya Ulli Wolff), adalah algoritma simulasi Monte Carlo yang dapat diterapkan untuk model Ising, dimana spin yang akan dibalikkan bukan spin tunggal akan tetapi sekelompok spin (cluster). Kluster ini didefinisikan sebagai kumpulan spin yang terhubung yang memiliki orientasi spin yang sama.

Pada algoritma Wolff, 1 langkah Monte Carlo (Monte Carlo Step /MCS) adalah mengunjungi (baik secara berurut atau secara acak) setiap spin pada kisi dan melakukan pembalikan arah berdasarkan probabilitas yang dipilih. Menurut algoritma Wolff, spin planar diproyeksikan ke sumbu acak sehingga dan memperlakukannya sebagai. Selanjutnya prosedur kluster diadopsi sebagaimana untuk spin Ising, yaitu berdasarkan temperatur pada probabilitas $P=1-\exp(-2\beta J)$, dengan J adalah interaksi gabungan antar spin. Apabila tidak terjadi pembaharuan, maka orientasi spin yang berbeda dengan spin Ising, akan diperbaharui pada MCS selanjutnya.

Konfigurasi awal (dipilih secara acak) terbagi menjadi 1 set cluster yang terurai. Setiap cluster dikelompokkan sebagai unit tunggal dalam berbagai langkah pembaharuan. Setelah 1 MCS, akan ada konfigurasi spin baru yang diperoleh, interaksi dikembalikan pada orientasi semula dan proses dimulai lagi, dan seterusnya. Pada simulasi menggunakan algoritma Wolff, perlu dilakukan pengukuran pada beberapa langkah MCS, misalnya 10 MCS.