

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Termodinamika berkembang pesat pada pertengahan abad ke-19 melalui kontribusi tokoh seperti Carnot, Joule, Clausius, dan Kelvin, yang membangun kerangka teoritis untuk menjelaskan perilaku makroskopik sistem fisik. Sementara itu, teori kinetik gas dan konsep entropi yang dikembangkan oleh Boltzmann menghubungkan dinamika molekul dengan entropi, membentuk dasar bagi lahirnya mekanika statistik. Disiplin ini tidak hanya menjelaskan keteraturan makroskopik, tetapi juga fluktuasi spontan yang terjadi secara alami dalam sistem fisik (Pathria, 2001). Fenomena seperti pendidihan, penyebaran cahaya, dan dinamika biologis bergantung pada fluktuasi tersebut. Dengan demikian, mekanika statistik dan termodinamika bersama-sama menyediakan dasar teoritis untuk memahami kestabilan maupun ketidakstabilan struktural dalam sistem kompleks (Chandler, 1987)

Penelitian mengenai sifat termodinamik material magnetik telah menjadi inti dari fisika materi terkondensasi selama beberapa dekade, tidak hanya karena kekayaan fenomena fisika yang ditawarkannya, tetapi juga karena potensi aplikasinya dalam teknologi, mulai dari penyimpanan data hingga material komputasi. Pemahaman mendalam tentang bagaimana interaksi mikroskopis spin (momen magnetik) memengaruhi perilaku makroskopis suatu sistem saat terpapar perubahan suhu atau medan magnet adalah tujuan utama dari studi ini. Model-model teoretis, seperti model Ising, Heisenberg, dan Potts, telah terbukti sangat efektif dalam menyederhanakan kompleksitas interaksi multi-partikel, memungkinkan analisis fundamental tentang transisi fasa magnetik dan sifat-sifat kritis (Heine et al., 2021)

Transisi fasa sendiri merupakan salah satu aspek paling menarik dalam fisika statistik, di mana perubahan parameter makroskopis seperti suhu atau tekanan dapat memicu perubahan drastis pada struktur dan sifat kolektif suatu sistem, misalnya dari fase paramagnetik (tidak ada order magnetik) ke feromagnetik (order magnetik jarak jauh) pada material magnetik ataupun sebaliknya. Studi tentang transisi fasa tidak hanya mengungkap sifat-sifat fundamental materi, tetapi juga memberikan wawasan tentang universalitas perilaku sistem di dekat titik kritis, terlepas dari detail mikroskopisnya. (Tokura et al., 2019)

Secara umum, transisi fasa berkaitan dengan fenomena kerusakan simetri sistem. Untuk perubahan fase yang disebabkan oleh fluktuasi termal, sistem berada pada derajat tinggi pada temperatur tinggi karena semua ruang konfigurasi tersedia. Dengan menurunkan suhu akan mengurangi fluktuasi termal dan mengakibatkan keadaan stabil. (Surungan dan Okabe, 2012)

Faktor lain yang penting dalam perubahan fase adalah terjadinya perubahan entropi. Pada sistem feromagnet, ketika suhu diturunkan hingga mencapai suatu nilai tertentu yang disebut temperatur kritis maka akan terjadi transisi fasa. Sistem mengalami perubahan fase dari sistem paramagnetic ke feromagnetik. Temperatur kritis T_c untuk sistem



feromagnet dinamakan temperatur Curie. Fenomena ini sangat menarik untuk dikaji karena melibatkan interaksi spin, yaitu faktor mikroskopik.

Ernest Ising (1925) memperkenalkan model yang dapat menjelaskan fenomena magnetisasi spontan dari sistem feromagnetik (FM). Model Ising merupakan bentuk sederhana dari model Heisenberg untuk menyelesaikan model yang diusulkan oleh Lenz (1920) dalam mempelajari perubahan fase FM pada temperatur Curie. Model ini berisi tentang variabel diskrit yang menyajikan momen magnetik dari spin atom yang bernilai $s = +/ - 1$. Spin tersebut dimodelkan dalam sebuah kisi, dimana setiap spin dapat berinteraksi dengan spin terdekatnya (nearest-neighbors). Model Ising kisi 2D adalah salah satu contoh model statistik sederhana untuk menunjukkan magnetisasi spontan pada suatu sistem.

Dalam studi ini akan dikaji model spin kubik, yaitu salah satu dari model spin diskret dengan simetri polyhedral. Simetri polyhedral untuk model spin diperoleh dengan membagi sama besar sudut ruang 4π dari struktur bola (*sphere*). Ada lima kemungkinan tipe model dari struktur *polyhedral* yang dapat diperoleh yaitu: *tetrahedron*, *octahedron*, *hexahedron*, *icosahedron*, dan *dodecahedron*. Spin tersebut dimodelkan dalam suatu kisi yang saling berinteraksi seperti halnya dengan model Ising. Dengan menggunakan metode simulasi Monte Carlo, dapat dihitung parameter keteraturan (order parameter) dan memperkirakan temperatur kritis dari setiap model. Untuk penelitian ini, dikhususkan untuk mempelajari model vertex-cubic spin.

Pada penelitian sebelumnya (Surungan dan Okabe, 2008) ditelaah sistem FM pada kisi 2D, dan penelitian lainnya (Sutiono, 2013) menelaah sistem dengan struktur kisi berbeda, yaitu kisi berlapis (3D). Sistem dengan dimensi ruang yang lebih besar secara teoretik diharapkan akan memiliki temperatur kritis yang lebih tinggi karena jumlah tetangga dari masing-masing spin lebih banyak.

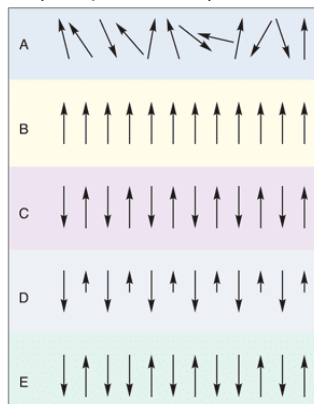
Penelitian ini secara khusus berfokus pada studi sifat termodinamika model magnetik dengan model vertex-cubic spin yang tersusun pada kisi berukuran $L \times L \times n$. Interaksi spin didefinisikan melalui produk skalar vektor spin, mirip dengan model Heisenberg yang didiskritisasi pada 8 orientasi vertex-cubic. Penelitian ini bertujuan untuk menyelidiki bagaimana transisi fasa, magnetisasi, dan sifat-sifat termodinamik lainnya seperti panas jenis, terpengaruh oleh topologi kisi dan potensi frustrasi yang ditimbulkannya. Hasilnya diharapkan dapat memberikan pemahaman lebih lanjut tentang perilaku magnetik yang tidak hanya memperkaya teori fisika statistik tetapi juga berpotensi relevan untuk pengembangan material magnetik fungsional baru di masa depan.



Magnetik

merupakan dasar dalam fisika benda terkondensasi, yang magnetik atomik atau elektron. Fenomena ini mengategorikan responsnya terhadap medan magnet eksternal dan orde . Paramagnetisme muncul pada material dengan elektron tidak momen magnetiknya sejajar lemah dengan medan eksternal

tetapi menjadi acak saat medan dihilangkan, tanpa orde jarak jauh. Sebaliknya, diamagnetisme adalah penolakan lemah terhadap medan magnet, yang ada pada semua material karena gerakan orbital elektron. Fenomena magnetik kooperatif yang paling banyak dipelajari meliputi feromagnetisme, yang ditandai oleh orde jarak jauh spontan dari momen magnetik di bawah suhu kritis (suhu Curie), menghasilkan sifat magnetik yang kuat. Antiferomagnetisme melibatkan penyelarasan momen magnetik anti-paralel pada situs-situs yang berdekatan, menghasilkan tidak ada magnetisasi makroskopik total, sedangkan ferrimagnetisme adalah varian di mana momen anti-paralel tidak sama, menghasilkan momen magnetik total. Pemahaman tentang keadaan magnetik fundamental ini sangat penting untuk menganalisis sistem magnetik yang lebih kompleks (Scepka, 2016).



Gambar 1. Klasifikasi Magnetik

(a)Paramagnetisme, (b) Feromagnetisme, (c) Anti-Feromagnetisme,
(d) Ferrimagnetisme, (e) enforced magnetism

Sumber: (Scepka, 2016)

1.2.2 Perubahan Fase

Fase adalah sebuah keadaan suatu materi dimana sifat unsur penyusunannya seragam. Contoh sederhana misalnya es, air dan uap air yang masing-masing adalah fase dari air (H_2O). Fase ditentukan oleh fungsi termodinamika, yaitu fungsi energi bebas. Fungsi termodinamika adalah fungsi dari beberapa parameter makroskopik seperti suhu dan tekanan sehingga fase unsur mikroskopis ditentukan oleh nilai parameter tersebut. Fase dapat dikarakterisasi oleh kuantitas fisik yang bervariasi. Salah satunya adalah parameter order, yang mengukur bagaimana elemen mikroskopik membuat fase makroskopik berada pada keadaan yang seragam. Parameter order berhubungan dengan kerusakan simetri dari sistem yang mengukur derajat dari asimetri dalam fase kerusakan (Nishimori & Ortiz, 2011).

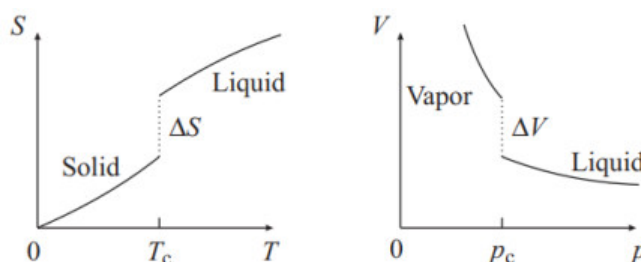


Perubahan fase adalah fenomena di mana suatu zat berubah dengan cepat dari satu keadaan termodinamika ke keadaan lain, yang disebabkan oleh perubahan parameter seperti suhu, tekanan dan magnetisasi. Perubahan fase dapat terjadi melalui pemanasan termal dan non-termal. Namun kebanyakan yang terjadi adalah perubahan fase akibat fluktuasi termal dan terjadi pada temperatur tertentu. Tipe perubahan fase ini disebut sebagai perubahan fase klasik (Surungan & Okabe,

Berdasarkan sifat fungsi energi bebas, fase transisi dapat dibagi menjadi dua jenis yaitu perubahan fase orde pertama (FO) dan orde kedua (SO). Pada transisi FO, turunan pertama fungsi energi bebas bersifat *discontinuous*, sedangkan pada transisi SO bersifat *continuous*. Oleh karena itu, transisi SO disebut juga fase transisi *continuous*.

1.2.2.1 Perubahan Fase Orde Pertama

Perubahan fase tersebut dapat dijelaskan secara teoritis dengan adanya diskontinuitas atau singularitas dalam fungsi yang menggambarkan sifat fisik makroskopis. Sifat-sifat ini, seperti entropi (S), volume (V), dan panas spesifik (C), dapat mewakili diskontinuitas (perubahan mendadak), puncak tajam, atau perbedaan pada titik transisi. Contoh pencairan es menunjukkan bahwa panas laten harus ditambahkan ke sistem, yang menyebabkan entropi meningkat dengan cepat. Demikian pula, ketika air mendidih menjadi uap, volume air berubah secara terputus-putus. Dalam fisika, transisi fase muncul dari persaingan antara energi internal (E) suatu sistem dan entropinya (S). Kedua kuantitas ini menentukan energi bebas sistem ($F = E - TS$). Energi (E) mendorong keteraturan dalam suatu sistem, sedangkan entropi (S) mendorong ketidakteraturan. Mengingat nilai variabel eksternal seperti suhu (T), kedua faktor ini memainkan peran utama dalam mengubah fase suatu sistem.



Gambar 2. Perubahan Fase Orde Pertama

Sumber: (Nishimori & Ortiz, 2011)

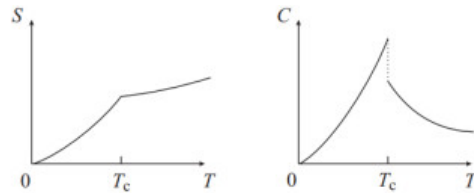
Perubahan fase secara umum dikelompokkan berdasarkan sejauh mana sifat-sifat fisika menunjukkan diskontinuitas. Jika turunan pertama dari energi bebas F mengalami diskontinuitas, itu adalah transisi orde pertama. Sebaliknya, jika diskontinuitas atau divergensi baru muncul pada turunan orde kedua atau lebih tinggi dari energi bebas, transisi tersebut disebut kontinu atau orde kedua. Contoh transisi orde pertama adalah perubahan es menjadi air, yang melibatkan kalor laten dan perubahan mendadak pada entropi ($\Delta S > 0$), karena entropi adalah turunan pertama dari energi bebas ($S = -(\partial F / \partial T)_V$).



Fase Orde Kedua

Orde kedua ditandai oleh entropi yang kontinu tetapi diskontinuitas pada turunan kedua dari entropi, yang merupakan turunan dari entropi. Pada banyak transisi orde kedua, turunan kedua menunjukkan divergensi pada suhu transisi. Contohnya adalah transisi pada helium-4 cair (menjadi superfluida) dan transisi magnetik pada material magnetik. Uniknya, transisi Kosterlitz-

Thouless pada sistem berdimensi ruang rendah adalah kasus di mana semua turunan energi bebas kontinu, namun energi bebas tetap memiliki singularitas esensial secara matematis.



Gambar 3. Perubahan Fase Orde Kedua

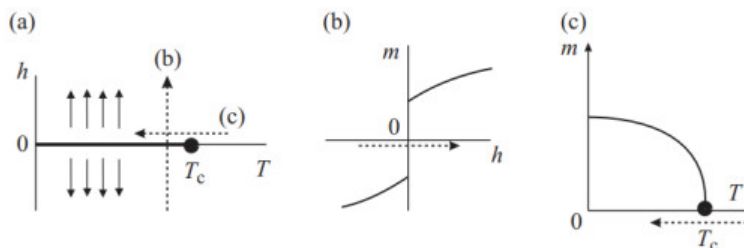
Sumber: (Nishimori & Ortiz, 2011)

Dari perspektif mekanika statistik, termodinamika berasal dari energi bebas, yang ditentukan oleh fungsi partisi Z . Fungsi partisi ini didefinisikan sebagai,

$$Z = e^{-F/k_B T} = Tr e^{-H/k_B T} \quad (1)$$

melibatkan konstanta Boltzmann (k_B) dan Tr (trace) mewakili jumlah dari semua derajat kebebasan yang masuk ke dalam Hamiltonian H dari sistem yang diteliti. Karena Z adalah jumlah eksponensial dari $-H/k_B T$, non-analitisitas energi bebas (yaitu, singularitas yang mendefinisikan transisi fasa) hanya dapat terjadi dalam batas termodinamika, di mana volume sistem (V) dan jumlah derajat kebebasan (N , seperti spin magnetik) menjadi tak terbatas, dengan rasio N/V tetap konstan.

Material dapat menunjukkan transisi orde pertama maupun orde kedua tergantung pada kondisinya. Sebagai ilustrasi, diagram fasa material magnetik dalam medan magnet eksternal h menunjukkan bahwa jika suhu (T) di bawah suhu kritis (T_c), magnetisasi (m) akan berubah secara tiba-tiba dari negatif ke positif saat medan magnet eksternal h dipindai dari arah negatif ke positif; ini merupakan transisi orde pertama.



Gambar 4. Perubahan Fase Magnetik

(a) diagram fasa material magnetik, (b) transisi fasa orde pertama, (c) transisi fasa orde kedua

Sumber: (Nishimori & Ortiz, 2011)



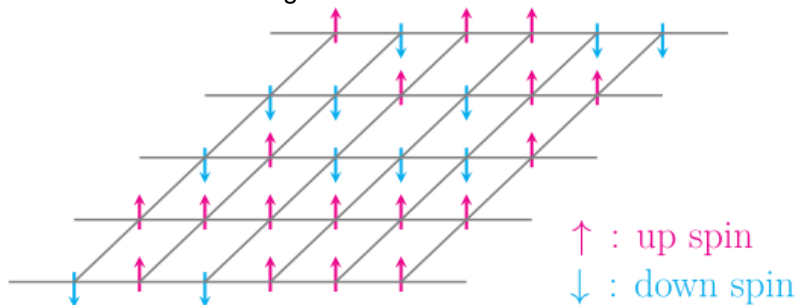
kan saat medan eksternal mendekati nol dari arah positif ($h \rightarrow 0$) maka m masih tetap ada. Ini disebut magnetisasi spontan, yang merupakan transisi orde pertama. Namun, jika suhu di atas T_c ($T > T_c$), magnetisasi $m = 0$ tanpa singularitas. Jika medan eksternal dijaga sangat kecil dan diturunkan melewati T_c , magnetisasi spontan akan berubah

secara kontinu dari nol ke nilai positif, yang mengindikasikan transisi orde kedua (Nishimori dan Ortiz, 2011).

1.2.3 Model Magnetik

Perlu diketahui bahwa dalam model magnetik, spin merupakan momen magnet yang timbul akibat rotasi elektron. Dengan kata lain, model-model spin yang dikaji dalam studi ini merepresentasikan banyaknya kemungkinan cara elektron berotasi. Terdapat beberapa model spin fundamental yang sering digunakan:

- a. **Model Ising:** Ini adalah model spin paling sederhana, di mana setiap spin hanya dapat mengambil dua orientasi diskrit, biasanya direpresentasikan sebagai "atas" (+1) atau "bawah" (-1) sepanjang satu sumbu tertentu. Interaksi hanya terjadi antara spin-spin tetangga terdekat, dan energi sistem bergantung pada orientasi relatif spin-spin tersebut. Meskipun sederhana, Model Ising mampu menjelaskan transisi fasa magnetik.



Gambar 5. Ilustrasi spin pada Model Ising

Sumber:

- b. **Model Heisenberg:** Model ini merupakan generalisasi yang lebih realistis, di mana setiap spin direpresentasikan sebagai vektor tiga dimensi yang dapat menunjuk ke arah mana pun dalam ruang. Interaksi antar spin dalam Model Heisenberg didefinisikan oleh produk skalar dari vektor spin tetangga ($S_i \cdot S_j$). Hal ini menunjukkan bahwa energi minimum tercapai ketika spin-spin sejajar (interaksi feromagnetik) atau anti-sejajar (interaksi antiferomagnetik). Model Heisenberg inilah yang menjadi dasar bagi penelitian ini, di mana spin dibatasi pada 8 orientasi diskrit yang sesuai dengan simpul kubik, namun esensi interaksi vektornya tetap dipertahankan.
- c. **Model Potts:** Sebagai generalisasi dari Model Ising, Model Potts memungkinkan setiap spin untuk mengambil q keadaan diskrit yang berbeda, di mana $q \geq 2$. Jika $q = 2$, Model Potts identik dengan Model Ising. Keadaan-keadaan ini tidak selalu memiliki interpretasi spasial langsung sebagai arah, melainkan sebagai "jenis" atau "warna". Interaksi biasanya hanya terjadi jika berada dalam keadaan yang sama. Model Potts sangat digunakan tidak hanya dalam magnetisme tetapi juga dalam fenomena transisi fasa lainnya seperti pada kristal cair atau



Tabel 1. Perbandingan Model Spin Magnetik

Fitur	Model Ising	Model Heisenberg	Model Potts
Orientasi Spin	Dua keadaan diskrit (+1 atau -1)	Vektor 3D (arah kontinu)	q keadaan diskrit ($q \geq 2$)
Interaksi	Antar tetangga terdekat	Produk skalar vektor spin tetangga	Spin tetangga dalam keadaan yang sama
Dimensi	Dapat diterapkan pada berbagai dimensi	Dapat diterapkan pada berbagai dimensi	Dapat diterapkan pada berbagai dimensi
Aplikasi	Feromagnetisme, transisi fasa	Sistem magnetik, titik kritis, transisi fasa	Magnetisme, transisi fasa, kristal cair, dll.
Kompleksitas	Relatif sederhana	Lebih kompleks dari Ising	Generalisasi dari Ising

1.2.4 The Platonic Solids

The Platonic Solids merujuk pada lima *polyhedral* cembung beraturan dalam tiga dimensi: tetrahedron, oktahedron, kubus, ikosahedron, dan dodekahedron. Masing-masing bentuk ini memiliki wajah yang identik, simpul dengan sudut yang sama, serta susunan sisi yang seragam. Secara matematis, hanya lima bentuk seperti itu yang memungkinkan, menjadikannya sebagai struktur geometris yang unik dan terdefinisi sempurna oleh simetri.

Salah satu ciri menarik dari *The Platonic Solids* adalah hubungan dualitasnya. Untuk setiap solid, dapat dibentuk versi “dual” dengan menempatkan simpul pada pusat setiap wajah. Misalnya, oktahedron adalah dual dari kubus, dan sebaliknya. Tetrahedron bersifat istimewa karena merupakan dual dari dirinya sendiri. Hubungan ini memperlihatkan keteraturan struktural yang sangat tinggi dan menjadikannya relevan dalam konteks geometri murni maupun fisika teoritis.

Dalam sistem fisika tiga dimensi, arah-arrah yang ditentukan oleh simpul dari *The Platonic Solids* tersebar secara merata di permukaan bola. Hal ini membuatnya ideal sebagai referensi arah dalam pengukuran atau pemodelan spasial. Simetri dan distribusi merata dari arah-arrah tersebut memungkinkan aplikasi dalam berbagai skenario eksperimen, termasuk penyusunan perangkat kuantum yang membutuhkan orientasi yang homogen dan terkontrol.

**Gambar 6.** *The Platonic Solids*

Sumber: (Ertaş et al., 2014)



1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah :

1. Menganalisis pengaruh ukuran kisi terhadap perilaku termodinamika model spin *vertex*-kubik, khususnya dalam hal panas jenis, magnetisasi, energi internal, dan rasio momen magnetik.
2. Meneliti efek jumlah lapisan terhadap transisi fasa dalam sistem kisi berlapis, serta melihat sejauh mana penambahan lapisan mengubah sifat kritis sistem.
3. Mengidentifikasi karakteristik suhu kritis T_c dari sistem spin diskrit dengan simetri kubik, dan bagaimana T_c bergantung pada ukuran dan ketebalan sistem.
4. Menyelidiki kestabilan orde magnetik dalam sistem berlapis dengan memanfaatkan indikator numerik seperti magnetisasi kuadrat rata-rata dan rasio momen magnetik.
5. Menyediakan dasar komputasional yang relevan untuk memahami sistem nyata berdimensi menengah, seperti struktur berlapis.

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan pemahaman yang lebih mendalam mengenai sifat-sifat termodinamik dari model magnetik kubik pada kisi kuasi tiga dimensi. Melalui pendekatan simulasi numerik dan analisis teoritis, diharapkan agar hasil penelitian ini dapat menjadi acuan penting dalam pengembangan teori medan efektif dan aplikasi material magnetik dalam teknologi canggih. Selain itu, penelitian ini diharapkan dapat menjadi dasar bagi studi lanjutan dalam fisika statistik dan material terstruktur secara kompleks.



BAB II

METODE PENELITIAN

2.1 Model Vertex-Cubic Spin

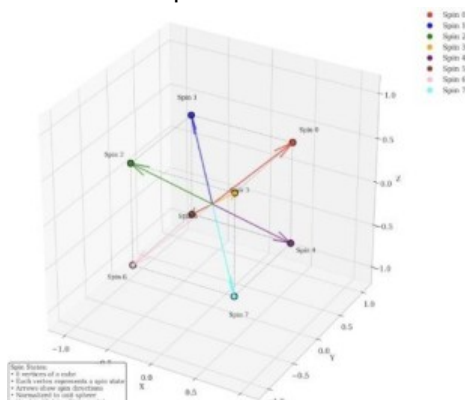
Kubik merupakan bagian dari simetri polihedral yang memiliki 8 titik sudut, 6 sisi, dan 12 rusuk. Model spin kubik adalah representasi diskrit dari orientasi spin dalam ruang tiga dimensi, di mana arah spin hanya dapat mengarah ke salah satu dari delapan simpul kubus. Simetri dari model ini mengikuti grup O_h , yaitu grup simetri kubus yang mencakup rotasi dan refleksi.

Tabel 2. Karakteristik Model Simetri Polyhedral. (Sumber: (Yunita et al., 2022))

Model	Vertices (Titik Sudut)	Faces (Sisi)	Edges (Rusuk)	Kelompok Simetri
Tetrahedron	4	4	6	S_4
Oktahedron	6	8	12	$O_h = S_4 \times C_2$
Kubik	8	6	12	O_h
Ikosahedron	12	20	30	$A_5 \times C_2$
Dodekahedron	20	12	30	$A_5 \times C_2$

Model spin ini merupakan penyederhanaan dari model Heisenberg dalam versi diskrit, di mana orientasi spin tidak kontinu, melainkan terbatas pada delapan arah tetap. Karena distribusi titik-titik pada permukaan bola satuan cukup merata dan simetris, model ini dapat menggambarkan sistem dengan anisotropi kubik, serta digunakan untuk menganalisis sistem magnetik dengan simetri ruang kubus.

Pemilihan model spin kubik relevan untuk mempelajari transisi fasa dan sifat kritis sistem tiga dimensi, terutama dalam kasus di mana pendekatan kontinu terlalu kompleks atau tidak sesuai secara fisik. Meskipun memiliki simetri yang lebih rendah dibandingkan dari beberapa model lain, model kubik sering digunakan karena kesederhanaannya dalam implementasi komputasi, dan tetap mampu menangkap aspek penting dari perilaku kolektif spin dalam sistem diskrit.



ar 7. Penomoran titik sudut (*vertices*) pada kubik
Sumber: (Ueda et al., 2017)



2.2 Hamiltonian Sistem

Energi total sistem (Hamiltonian) yang disimulasikan didefinisikan oleh interaksi antara spin-spin tetangga terdekat. Hamiltonian model ini adalah (Yunita et al., 2022):

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (2)$$

di mana J adalah konstanta kopling (*coupling constant*), $\vec{s}_i$ dan $\vec{s}_j$ adalah vektor unit yang merepresentasikan orientasi spin pada situs i dan j , dan penjumlahan $\langle i,j \rangle$ dilakukan atas semua pasangan spin tetangga terdekat pada kisi. Dalam program ini, nilai J diasumsikan positif (ferromagnetik) dan seringkali diatur menjadi 1 untuk menyederhanakan perhitungan.

2.3 Model Kisi Berlapis

Model kisi berlapis merupakan generalisasi sistem dua dimensi (2D) menjadi sistem kuasi-tiga dimensi dengan menambahkan satu atau lebih lapisan yang tersusun paralel dalam arah ketiga (biasanya arah z). Dalam model ini, setiap lapisan tersusun dalam kisi dua dimensi, seperti persegi, dan terhubung secara vertikal melalui interaksi antarlapis. Pendekatan ini memungkinkan studi tentang pengaruh ketebalan sistem terhadap perilaku termodinamika, khususnya dalam konteks transisi fase dan fenomena kritis.

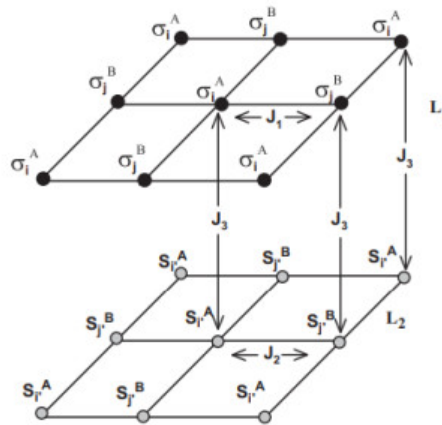
Kisi berlapis memainkan peran penting dalam memahami hubungan antara sistem dua dimensi dan tiga dimensi. Telah diketahui secara luas bahwa sistem dua dimensi, seperti model Ising klasik, tidak menunjukkan transisi orde pertama dalam rentang suhu tertentu tanpa domain, sedangkan sistem tiga dimensi memfasilitasi transisi yang lebih mendadak dan kompleks. Penggunaan struktur berlapis meningkatkan dimensionalitas sistem, memungkinkan transisi fase yang lebih robust, meskipun setiap lapisan mengalami dinamika dua dimensi secara independen.

Struktur berlapis telah dipelajari secara luas, terutama dalam konteks model Ising, Bloom-Kapell, dan Potts. Studi numerik menggunakan pendekatan seperti teori medan efektif (EFT), simulasi Monte Carlo, dan pendekatan renormalisasi telah menunjukkan bahwa jumlah lapisan secara langsung memengaruhi suhu kritis T_c dan intensitas fluktuasi energi. Sebagai contoh, (Ertaş et al., 2014) menemukan bahwa sistem Bloom-Kapell dua lapis dengan spin $3/2$ menunjukkan transisi fase yang lebih tajam daripada sistem satu lapis, dan bahwa kapasitas panas maksimum serta nilai akumulasi material pengikat bergeser ke suhu yang lebih tinggi seiring bertambahnya jumlah lapisan.

Model kisi berlapis juga menggambarkan struktur nyata dalam sistem material tipis, material dua dimensi berlapis-lapis seperti grafena, dan sistem berlapis dalam sistem kuantum. Dalam konteks ini, pengaruh menjadi krusial untuk memahami fenomena seperti anisotropi spin, dan perilaku superkonduktor berlapis-lapis. Dengan demikian, kisi berlapis memberikan dasar fisik dan komputasi yang kuat bagaimana perilaku sistem berubah seiring bertambahnya



ketebalan, membuka jalan untuk memahami transisi fase dalam sistem berdimensi menengah.



Gambar 8. Kisi Persegi Berlapis

2.4 Penyekalan Ukuran Berhingga

Percobaan pada sistem nyata dan perhitungan menarik seperti simulasi Monte Carlo menggunakan sistem berhingga. Dengan mengamati bagaimana kuantitas C, M, χ bervariasi untuk ukuran kisi yang berbeda, hal tersebut dimungkinkan untuk menghitung nilai eksponen kritis (Cardy, 1996)

Fungsi termodinamik secara umum merupakan besaran ekstensif yaitu besarnya bergantung pada ukuran sistem. Sifat ini memungkinkan penentuan temperatur dan eksponen kritis sistem melalui metode penyekalaan ukuran berhingga (Finite Size Scaling). Andaikan suatu fungsi termodinamik $f(L)$ bergantung pada ukuran sistem L sebagai berikut:

$$f(L) = Lg(L) \quad (3)$$

maka dapat ditunjukkan bahwa untuk sistem yang mengalami perubahan fase orde kedua, fungsi termodinamik $f(L)$ bersifat homogen tepat pada temperatur kritis; yang berarti bahwa $f(L_1) = f(L_2)$, dimana L_1 dan L_2 adalah dua ukuran berbeda dari sistem. Untuk perbandingan korelasi, fungsi penyelakaannya adalah sebagai berikut:

$$Q = f((T - T_c)L^\nu) \quad (4)$$

Persamaan (2.3) menunjukkan hubungan penyekalaan untuk besaran termodinamika Q di sekitar titik kritis. Di sini, T adalah temperatur sistem dan T_c adalah temperatur kritis tempat transisi fase orde kedua terjadi. L merepresentasikan ukuran karakteristik sistem, yang berperan penting dalam analisis ukuran terbatas,



eksponen kritis yang mengatur bagaimana panjang korelasi dan menyimpang di dekat T_c . Bentuk f adalah fungsi penyekalaan iratkan bahwa data dari berbagai ukuran sistem dan temperatur am satu kurva ketika diplot terhadap argumen diskalakan $(T -$

2.5 Deskripsi Program Komputasi

Penelitian ini menggunakan program komputasi yang dikembangkan secara khusus dalam bahasa pemrograman C untuk mensimulasikan sifat termodinamika model magnetik kubik pada kisi kuasi tiga dimensi. Program ini akan dikonfigurasi untuk kisi berukuran 8×8 dan akan dibandingkan hasilnya dengan kisi berukuran 16×16 , 24×24 , dan 32×32 untuk menganalisis efek ukuran sistem terhadap hasil simulasi.

Program ini dirancang untuk mensimulasikan perilaku sistem magnetik dengan spin berbentuk kubus (8 orientasi spin yang mungkin) pada kisi berlapis dua dimensi dengan kondisi batas periodik. Tujuan utamanya adalah untuk menghitung berbagai parameter termodinamika seperti energi, panas spesifik, dan parameter orde pada berbagai suhu untuk memahami transisi fase dan sifat-sifat kritis sistem.

2.5.1 Struktur dan Komponen Utama Program

Kode didalam file C terstruktur dengan beberapa fungsi utama yang saling berinteraksi untuk menjalankan simulasi Monte Carlo:

- main():** Fungsi utama yang menginisialisasi parameter simulasi (jumlah langkah Monte Carlo, rentang suhu), memanggil fungsi-fungsi inisialisasi, menjalankan loop simulasi suhu, dan mencetak hasil akhir.
- period():** Fungsi ini bertanggung jawab untuk menetapkan *Periodic Boundary Conditions* yang kita akan sebut dengan *PBC* untuk kisi dua dimensi. Ini memastikan bahwa spin di tepi kisi berinteraksi dengan spin di sisi berlawanan, mensimulasikan sistem tak terbatas.
- mset():** Mendefinisikan 8 orientasi spin yang mungkin, yang merepresentasikan simetri ikosahedron. Setiap orientasi spin direpresentasikan oleh vektor $\vec{m} = (m_x, m_y, m_z)$ dalam ruang tiga dimensi.
- eset():** Menghitung energi interaksi (*coupling rule*) antara dua spin. Energi interaksi antara dua spin i dan j didefinisikan sebagai $E_{ij} = -(\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j)$, di mana $\vec{m}_i$ dan $\vec{m}_j$ adalah vektor orientasi spin.
- rset():** Menyiapkan tabel refleksi spin (rr). Fungsi ini penting untuk algoritma *Wolff*, di mana spin direfleksikan terhadap bidang tertentu untuk membentuk kluster (lampiran).
- spinset():** Menginisialisasi semua spin pada kisi ke orientasi awal tertentu (dalam kasus ini, semua spin diatur ke orientasi $isp[la] = 0$)
- sineset():** Melakukan pra-kalkulasi nilai sinus dan kosinus untuk setiap posisi kisi. Ini digunakan dalam perhitungan panjang korelasi dan parameter orde lainnya yang melibatkan komponen spasial.



mengimplementasikan loop utama simulasi Monte Carlo. Di dalam program menjalankan sejumlah langkah ekuilibrasi (*nmcs1*) dan langkah pengukuran (*nmcs2*). Program ini secara kondisional menerapkan ritma pembaruan spin, baik Metropolis (*metro()*) atau *Wolff* berdasarkan definisi *#define update*. Dalam konfigurasi saat ini, *Wolff* yang digunakan.

- i. **metro()**: Mengimplementasikan algoritma Monte Carlo Metropolis. Dalam setiap langkah, sebuah spin dipilih secara acak, orientasinya diubah secara acak, dan perubahan diterima atau ditolak berdasarkan kriteria *Metropolis-Hastings* (perubahan energi dan probabilitas *Boltzmann*).
- j. **single_clus()**: Mengimplementasikan algoritma *Wolff Cluster Update*. Algoritma ini lebih efisien dalam mengatasi *critical slowing down* di dekat transisi fase. Ia bekerja dengan membangun kluster spin yang berorientasi paralel dan merefleksikannya secara bersamaan.
- k. **ranset()** dan **rnd()**: dua fungsi ini terletak dalam file berbeda dan dipanggil secara eksternal. Fungsi-fungsi ini adalah implementasi dari generator bilangan acak 32-bit. *ranset()* digunakan untuk menginisialisasi *seed* generator bilangan acak, sementara *rnd()* menghasilkan deret bilangan acak yang dibutuhkan untuk pemilihan spin, orientasi baru, dan keputusan probabilitas.

2.5.2 Parameter yang Diukur

Selama fase pengukuran, program mengumpulkan data untuk menghitung sifat-sifat termodinamika berikut:

- a. **Suhu (T)**: Variabel independen yang diubah selama simulasi. Suhu dikaitkan dengan parameter β melalui hubungan $1/\beta = kT^2$, di mana k adalah konstanta *Boltzmann*. Dalam konteks simulasi ini, k seringkali diatur menjadi 1.
- b. **Parameter Orde Kuadrat (M^2)**: Mengukur rata-rata kuadrat magnetisasi total sistem. Magnetisasi total (M) didefinisikan sebagai jumlah vektor spin pada seluruh kisi: $M = \sum_i \vec{s}_i$. Secara umum, $\langle M^2 \rangle$ dihitung sebagai:

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{N_{mcs}} \sum_{k=1}^{N_{mcs}} \left(\sum_{i=1}^N \vec{s}_i^{(k)} \right)^2 \quad (5)$$

di mana N adalah jumlah spin pada kisi, dan N_{mcs} adalah jumlah langkah Monte Carlo untuk pengukuran.

- c. **Parameter Orde Pangkat Empat Rata-rata ($\langle M^4 \rangle$)**: Digunakan bersama dengan $\langle M^2 \rangle$ untuk menghitung *Binder Cumulant*, sebuah indikator kuat untuk transisi fase orde kedua, yang didefinisikan sebagai (Jufrin, 2015):

$$U_L = \frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2} \quad (6)$$

- d. **Parameter orde jarak menengah dan jarak jauh (fg_2, fg_4)**: Berdasarkan implementasi dalam kode, fg_2 berkaitan dengan korelasi antara spin yang terpisah sejauh setengah ukuran kisi ($L/2$) baik dalam arah x maupun y .

Sementara itu fg_4 berkaitan dengan korelasi pada jarak seperempat ukuran kisi. Ukuran ini memberikan wawasan tentang bagaimana spin-spin pada jarak menengah hingga jauh dalam sistem, yang penting untuk sifat-sifat kritis dan transisi fase. Output fg_2 dan fg_4 yang digunakan untuk mencari rasio korelasi (Q_L) (Jufrin, 2015).

$$Q_L = \frac{g(L/2)}{g(L/4)} \quad (7)$$



- e. **Energi Rata-rata per Spin ($\langle E \rangle$):** Energi internal rata-rata sistem, dihitung sebagai rata-rata energi total sistem per spin. Energi total sistem (E) adalah jumlah interaksi antara semua pasangan spin tetangga:

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} E_{ij} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (8)$$

maka, energi rata-rata per spin adalah:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N \cdot N_{mcs}} \sum_{k=1}^{N_{mcs}} E^k \quad (9)$$

- f. **Panas jenis (c_v):** Mengukur fluktuasi energi sistem terhadap suhu. Panas spesifik pada volume konstan dapat dihitung dari fluktuasi energi internal menggunakan hubungan:

$$C_v = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle) \quad (10)$$

di mana $\langle E^2 \rangle$ adalah rata-rata kuadrat energi total. Puncak pada kurva panas spesifik seringkali mengindikasikan transisi fase.

- g. **Panjang Korelasi (ξ) (corr):** Mengukur sejauh mana orientasi spin saling berkorelasi. Pada titik transisi fase, panjang korelasi cenderung divergen. Dalam simulasi Monte Carlo, panjang korelasi dapat diestimasi dari fluktuasi magnetisasi atau dari fungsi korelasi spasial. Formula yang digunakan dalam kode:

$$\xi = \frac{1}{2 \sin \pi/L} \sqrt{\frac{\langle M^2 \rangle}{C_L}} \quad (11)$$

ini adalah estimasi panjang korelasi dari fluktuasi magnetisasi atau *susceptibility*.

2.6 Simulasi Monte Carlo

Simulasi komputer merupakan metode komputasi yang berperan penting dalam menyelesaikan berbagai permasalahan fisika, terutama sistem kompleks yang tidak dapat diselesaikan secara analitik. Metode ini memungkinkan eksplorasi dan analisis sistematis terhadap sifat-sifat fisika sistem. Selain itu, simulasi komputer bertindak sebagai eksperimen virtual, yang memungkinkan kita memahami respons atau perubahan sistem terhadap kondisi tertentu tanpa perlu eksperimen langsung. Dengan demikian, simulasi komputer menghubungkan teori dan eksperimen praktis.

Salah satu metode umum dalam menangani sistem fisika kompleks, seperti sistem multipartikel adalah simulasi Monte Carlo. Metode ini menggunakan teknik



statistik yang menggunakan bilangan acak untuk sistem dalam konteks probabilitas. Bilangan acak yang simulasi ini biasanya berupa bilangan pseudo-acak yang utama komputer deterministik (Surungan, 2000).

statistik, besaran fisika suatu sistem dihitung dengan mencari dari berbagai konfigurasi mikro yang dapat terjadi pada suhu

tertentu. Karena itu, jika terdapat sejumlah M *microstates*, maka rerata termal dari suatu besaran Q dapat didefinisikan sebagai berikut (Surungan, 2000)

$$\langle Q \rangle_T \equiv \sum_{j=1}^M Q_j p_j, \quad (12)$$

dimana Q_j adalah besar nilai Q pada konfigurasi ke- j , sedangkan $j = 1, \dots, M$, misalnya untuk model Ising, $M = 2^N$ dan tanda $\langle \dots \rangle$ menyimbolkan rerata ensemble (majelis). p_j adalah probabilitas kemunculan konfigurasi ke- j tersebut dalam suatu sistem, yang dinyatakan sebagai berikut:

$$p_j \equiv \frac{e^{-\beta E_j}}{Z}; \quad Z \equiv \sum_j e^{-\beta E_j} \quad (13)$$

dimana E_j adalah energi dari konfigurasi ke- j , yang dihitung menggunakan persamaan Hamiltonian. Z merupakan fungsi partisi, sedangkan $1/\beta = kT$, dengan k adalah tetapan Boltzmann dan T adalah variabel temperatur.

2.6.1 Algoritma Wolff

Dalam algoritma Wolff, satu langkah Monte Carlo (MCS) mencakup kunjungan secara berurutan maupun acak ke seluruh spin pada kisi, lalu memperbarui masing-masing spin menurut probabilitas tertentu. Inti metode Wolff adalah memproyeksikan spin planar ke suatu sumbu acak sehingga prosedur Kosterlitz–Thouless (KT) pada spin Ising bisa diterapkan. Transisi KT sendiri merupakan transisi orde-tinggi: energi dalam sistem tetap mulus hingga turunan ke- n . Transisi semacam ini muncul, misalnya, pada model XY yang memiliki grup simetri $O(2)$.

Algoritma Wolff memudahkan identifikasi sekelompok spin yang, setelah proyeksi, berperilaku seperti spin Ising dengan orientasi sama. Kelompok spin ini kemudian diperbarui serempak sesuai suhu menggunakan probabilitas $p = 1 - e^{-\beta \Delta E}$. Spin yang orientasinya tidak selaras dengan spin Ising tersebut akan diperbarui pada MCS berikutnya.

Pada konfigurasi awal (dipilih acak), kisi terpecah menjadi kluster-kluster tak berhubungan. Tiap kluster diperlakukan sebagai satu unit selama beberapa siklus pembaruan. Setelah satu MCS selesai, kita memperoleh konfigurasi spin baru; interaksi spin dikembalikan ke orientasi semula, dan proses diulang. Dalam praktiknya, pengukuran fisik biasanya dilakukan setelah sejumlah langkah Monte Carlo misalnya setiap 10 MCS untuk memperoleh data statistik yang andal (Surungan & Okabe, 2017).

Simulasi dibagi menjadi dua fase utama:



nmcs1): Pada fase ini, sistem dibiarkan berevolusi selama sejumlah langkah Monte Carlo yang ditentukan ($nmcs1$) tanpa melakukan pengukuran. Tujuannya adalah untuk memastikan sistem mencapai keadaan setimbang pada suhu yang diberikan, sehingga konfigurasi awal tidak mempengaruhi hasil pengukuran.

nmcs2): Setelah ekuilibrase, pengukuran sifat-sifat sistem dilakukan selama sejumlah langkah Monte Carlo tambahan.

(nmcs2). Data yang dikumpulkan pada fase ini digunakan untuk menghitung nilai rata-rata termodinamika dan fluktuasinya.

Karena hasil observasi bersifat stokastik, pengukuran dilakukan dengan rata-rata ensemble dari banyak iterasi konfigurasi spin. Pendekatan ini sejalan dengan prinsip ergodik dalam statistika, yang menyatakan bahwa rata-rata waktu dapat digantikan oleh rata-rata ensemble.

2.7 Alat Penelitian

Alat yang digunakan pada penelitian, yaitu:

1. Laptop yang mempunyai sistem operasi Linux Ubuntu versi 6.11.0
2. Paket aplikasi compiler bahasa C (General Collection Compiler (GCC) dan GNUPLOT)

2.8 Prosedur Penelitian

Penelitian ini menggunakan metode simulasi Monte Carlo dengan Algoritma Wolff, lazim disebut *single-cluster (spin update)*. Algoritma Wolff bekerja dengan pedoman memilih suatu spin secara acak dan kemudian membentuk satu kluster, dengan pengujian ikatan yang berdekatan. Jumlah langkah yang diambil disebut *mcs* (*Monte Carlo Step*) tergantung pada kecepatan sistem mencapai keseimbangan. Masing-masing titik data diperoleh dari rerata jumlah *mcs*

Simulasi akan dijalankan melalui langkah-langkah berikut :

1. Membaca parameter input (ekuilibrisasi, pengukuran, dan seed)
2. Menginisialisasi generator bilangan acak khusus.
3. Menentukan dimensi panjang dan lebar untuk membangun kisi dua dimensi berlapis.
4. Menetapkan kondisi batas periodik dan hubungan antar tetangga terdekat.
5. Mengatur 8 orientasi spin kubik.
6. Membuat matriks energi interaksi antar spin.
7. Membentuk tabel transformasi refleksi spin.
8. Menetapkan temperatur awal dan perubahan temperatur (t dan Δt).
9. Menginisialisasi konfigurasi awal spin secara seragam.
10. Mengeksekusi proses ekuilibrisasi atau pemanasan sebanyak *step* yang ditentukan agar sistem dalam keadaan setimbang
11. Memperbaharui orientasi spin dengan sistem *cluster* pada titik kisi yang dipilih secara acak berdasarkan probabilitas $p = 1 - e^{-\beta \Delta E}$
12. Mengeksekusi proses pengukuran dengan langkah yang sama seperti proses



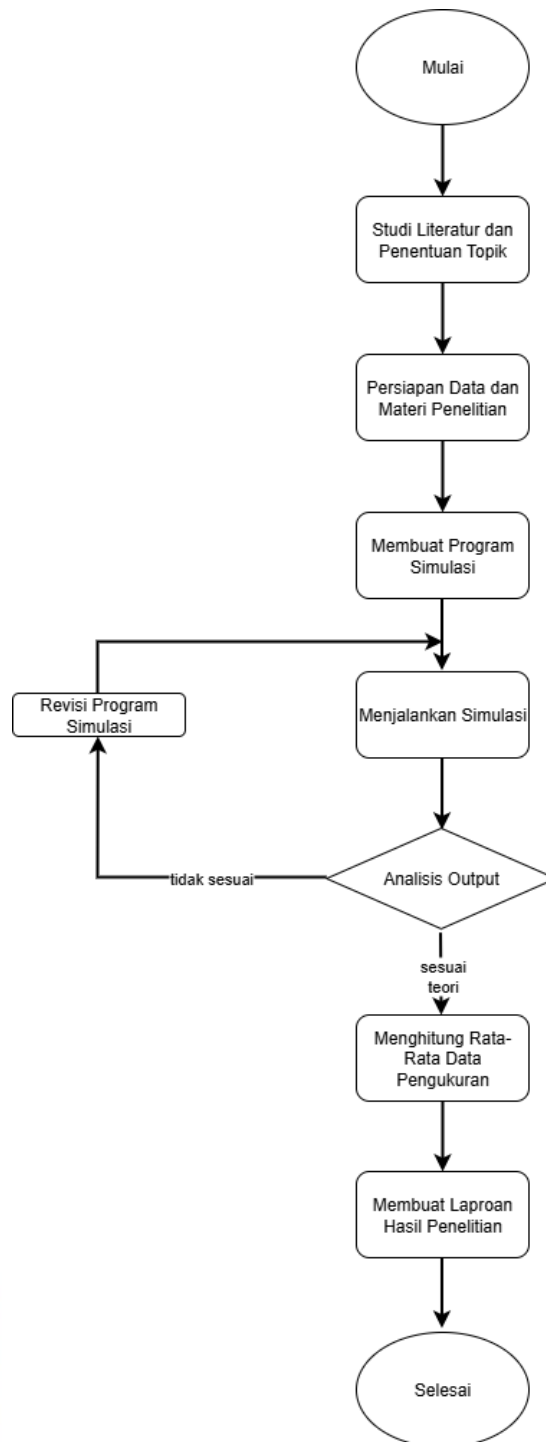
variabel seperti magnetisasi, energi dalam, korelasi orde jarak jauh, dsb.

Langkah (9) hingga (13) untuk setiap temperatur.

Mengakumulasi rata-rata dari setiap output yang telah diatur simulasi.

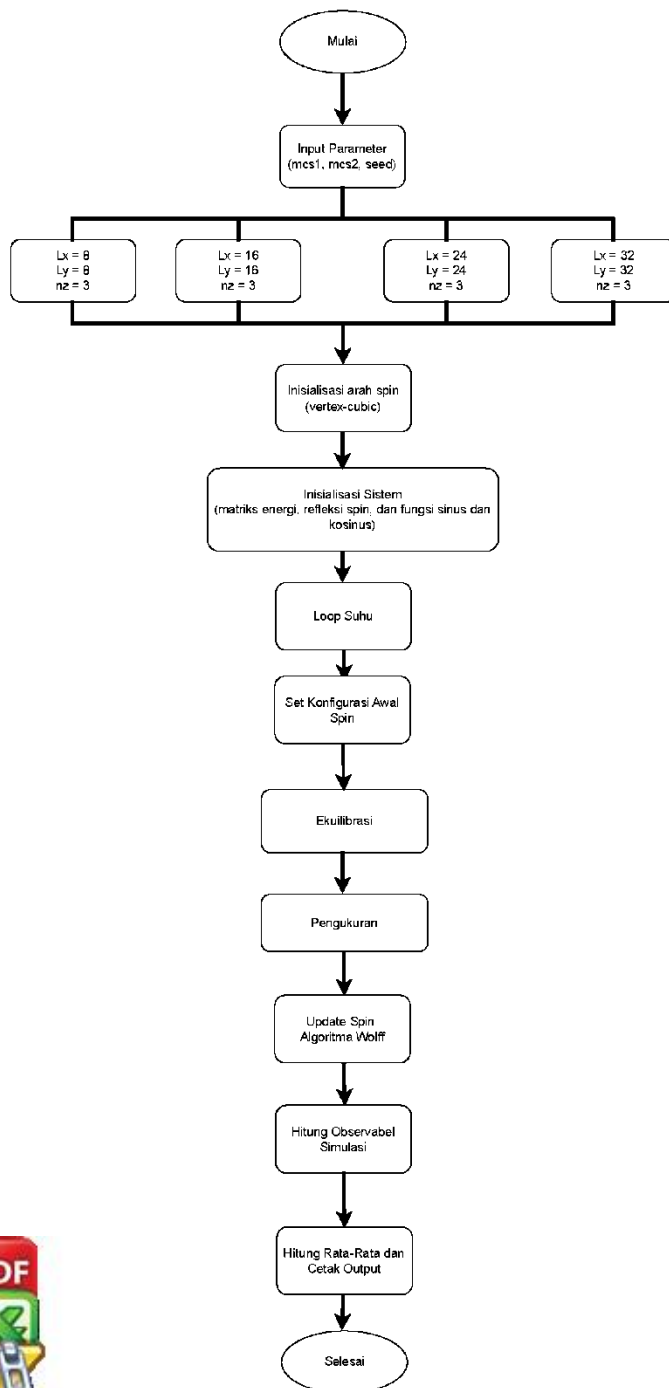
Hasil observasi.

2.9 Bagan Alir Penelitian



Gambar 9. Bagan Alir Penelitian

2.10 Bagan Alir Simulasi



Gambar 10. Bagan Alir Simulasi