



**PEMODELAN *TWO-LEGS ZIG-ZAG LADDER* DIMENSI DUA
UNTUK SIMULASI SIFAT MAGNETIK
DAN ENERGI INTERAKSI DARI SISTEM SPIN KUANTUM
 NH_4CuCl_3**

SKRIPSI

Diajukan sebagai tugas akhir guna memenuhi salah satu syarat untuk menyelesaikan studi pada Program Study Fisika (S1) dan mencapai gelar Sarjana Sains

Oleh

**Ihtiari Prastyaningrum
NIM 061810201002**

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2010**

PERSEMBAHAN

Dengan segala kerendahan hati, saya persembahkan karya ini sebagai rasa terimakasih dan hormat saya kepada:

1. Ayahanda Sinto Ahmadi dan Ibunda Titik Sulasmi tercinta, yang senantiasa menyebut nama kami dalam setiap doa dan sujudnya;
2. Seluruh guru dan dosen yang tanpa lelah telah mendidik dan mengantarkan kami hingga pintu dunia baru;
3. Seluruh keluarga besar SDN Simo 2, SLTP Negeri 1 Ponorogo, dan SMA Darul Ulum 2 BPP Teknologi Pondok Pesantren Darul Ulum Jombang yang telah memberikan doa dan dukungannya;
4. Almamater Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

MOTTO

**“Aku bersaksi tiada Tuhan selain Allah dan aku bersaksi bahwa Nabi Muhammad
adalah utusan Allah”**

**Ketenangan, kesabaran, dan keikhlasan memberikan kebahagiaan yang tak ternilai
harganya.**



PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Ihtiari Prastyaningrum

NIM : 061810201002

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul : “Pemodelan *Two-Legs Zig-Zag Ladder* Dimensi Dua untuk Simulasi Sifat Magnetik dan Energi Interaksi dari Sistem Spin Kuantum NH_4CuCl_3 ” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali jika dalam pengutipan substansi disebutkan sumbernya, dan belum pernah diajukan pada instansi manapun serta bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya tanpa adanya tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 28 Juni 2010

Yang menyatakan

Ihtiari Prastyaningrum

NIM 061810201002

SKRIPSI

PEMODELAN *TWO-LEGS ZIG-ZAG LADDER* DIMENSI DUA UNTUK SIMULASI SIFAT MAGNETIK DAN ENERGI INTERAKSI DARI SISTEM SPIN KUANTUM NH_4CuCl_3

Oleh

Ihtiari Prastyaningrum

NIM 0601810201002

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Lutfi Rohman, S.Si., M.Si.

Dosen Pembimbing Anggota : Dr. Edy Supriyanto, S.Si., M.Si.

PENGESAHAN

Skripsi telah diterima oleh Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember pada:

Hari :

Tanggal :

Tempat : Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Jember

Tim penguji,

Ketua,

Sekretaris,

Lutfi Rohman, S.Si., M.Si.
NIP 197208201998021001

Dr. Edy Supriyanto, S.Si., M.Si.
NIP 196712151998021001

Anggota I,

Anggota II,

Drs. Yuda Cahyoargo Hariadi, M,Sc., Ph.D.
NIP 196203111987021001

Nurul Priyantari, S.Si., M.Si.
NIP 197003271997022001

Mengesahkan
Dekan Fakultas MIPA,

Prof. Drs. Kusno, DEA., Ph.D
NIP. 196101081986021001

RINGKASAN

Pemodelan *Two-Legs Zig-Zag Ladder* Dimensi Dua untuk Simulasi Sifat Magnetik dan Energi Interaksi Sistem Spin Kuantum NH_4CuCl_3 ; Ihtiari Prastyaningrum, 061810201002; 2010; 49 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Studi mengenai sistem spin $1/2$ rantai antiferromagnetik model Heisenberg pada sistem spin kuantum suatu material merupakan pembahasan yang sangat menarik dalam beberapa tahun terakhir. Sebagai contoh adalah senyawa NH_4CuCl_3 . Senyawa ini merupakan salah satu keluarga senyawa KCuCl_3 . Bahan NH_4CuCl_3 bersifat antiferromagnetik dan mempunyai *plateau* magnetisasi. Berdasarkan hasil eksperimen ditemukan *plateau* magnetisasi pada $1/4$ dan $3/4$ saturasi magnetisasi penuh.

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan mode mengenai fenomena yang terdapat pada sistem spin kuantum NH_4CuCl_3 . Pemodelan *two-legs zig-zag ladder* dimensi dua didasarkan pada topologi *two-legs coupled zig-zag ladder* dari sistem spin kuantum NH_4CuCl_3 . Untuk menguji pemodelan, dilakukan pemrograman ALPS untuk memodelkan *two-legs zig-zag ladder* yang diaplikasikan pada Hamiltonian Heisenberg.

Pemodelan *two-legs zig-zag ladder* memiliki sistem frustrasi bersegi ganjil. Untuk menghitung harga harap suseptibilitas magnetis terhadap suhu, simulasi dijalankan dengan algoritma *Quantum Monte Carlo* ALPS. Simulasi dilakukan dengan cara merubah simetri kisi pada pemodelan *two-legs zig-zag ladder* dengan cara memberikan nilai konstanta δ yang berbeda. Hal tersebut dikarenakan Simulasi *Quantum Monte Carlo* tidak dapat menghitung harga harap suseptibilitas magnetik terhadap suhu pada sistem frustrasi penuh. Dengan cara ini diharapkan harga harap suseptibilitas magnetik dapat didekati. Simulasi *Quantum Monte Carlo* memberikan

hasil bahwa pemodelan *two-legs zig-zag ladder* dengan nilai konstanta kopling $J_1=2$ dan $J_2=4$ serta nilai konstanta $\delta = 0,7$ dan $\delta = 0,8$ dapat mendekati nilai Temperatur Neel bahan NH_4CuCl_3 yang didapatkan dari hasil eksperimen yang bernilai 4K.

Nilai konstanta kopling dan perubahan simetri kisi yang mendekati temperatur Neel NH_4CuCl_3 , kemudian dievaluasi lebih lanjut pada kurva magnetisasinya. Harga harap magnetisasi dari pemodelan *two-legs zig-zag ladder* dihitung dengan menggunakan algoritma DMRG (*Density Matrix Renormalization Group*).

Dari hasil simulasi untuk konstanta kopling $J_1=2$ dan $J_2=4$ dengan konstanta $\delta = 0,7$ didapatkan *plateau* pada $3/8$, $1/2$, $2/3$, dan $3/4$ saturasi magnetisasi penuh, sedangkan simulasi untuk konstanta kopling $J_1=2$ dan $J_2=4$ dengan konstanta $\delta = 0,8$ didapatkan *plateau* pada $3/8$, $1/2$, dan $3/4$ saturasi magnetisasi penuh. Hasil ini tentu saja berbeda dengan keberadaan *plateau* magnetisasi NH_4CuCl_3 dari hasil eksperimen dan berbeda dengan hasil pemodelan *two-legs zig-zag ladder* dimensi satu. Sedangkan nilai energi interaksi spin bahan NH_4CuCl_3 pada kondisi yang sama adalah sebesar $(-70,58 \pm 0,3)$ eV dan $(-75,59 \pm 0,3)$ eV.

Hasil penelitian memberikan kesimpulan bahwa pemodelan *two-legs zig-zag ladder* dimensi dua dapat memprediksi keberadaan Temperatur Neel bahan NH_4CuCl_3 , namun keberadaan *plateau* magnetisasi pada pemodelan *two-legs zig-zag ladder* dimensi dua tidak pada $1/4$ dan $3/4$ saturasi magnetisasi penuh. Walaupun demikian, pemodelan *two-legs zig-zag ladder* dimensi dua sudah mampu memetakan kurva magnetisasi dengan *plateau* magnetisasi pada $3/4$ saturasi magnetisasi penuh. Fakta dari penelitian ini menunjukkan perlunya dilakukan penelitian lebih lanjut mengenai pemodelan sistem spin kuantum NH_4CuCl_3 dalam sistem dimensi tiga dengan mempertimbangkan efek perubahan simetri kisi pemodelan *two-legs zig-zag ladder* pada topologi *two-legs coupled zig-zag ladder*.

KATA PENGANTAR

Syukur Alhamdulillah kami panjatkan ke hadirat Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya serta sentuhan kasih-Nya yang telah tercurah bagaikan tetesan air hujan di seluruh jagad raya. Cinta-Nya yang tertuang dalam luasnya ilmu, bagaikan jutaan mutiara nan indah terhampar dalam setiap inci alam semesta. Shalawat serta salam semoga senantiasa tercurah pada panutan kami Rosul Tercinta Muhammad SAW dalam setiap detik waktunya hingga sampai pada batas umur alam semesta.

Penulisan karya tulis ilmiah (SKRIPSI) yang berjudul **“Pemodelan *Two-Legs Zig-Zag Ladder* Dimensi Dua untuk Simulasi Sifat Magnetik dan Energi Interaksi dari Sistem Spin Kuantum NH_4CuCl_3 ”** ini kami maksudkan agar kami dapat memahami setitik dari luasnya hamparan rahasia keagungan-Nya. Rahasia yang terkadang sulit untuk diungkapkan oleh manusia yang tersimpan dalam disiplin ilmu fisika khususnya pada pemodelan bahan magnetis, serta untuk memenuhi salah satu syarat dalam menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Kami menyadari bahwa penyusunan karya tulis ilmiah ini tidak terlepas dari dukungan dan bantuan berbagai pihak, sehingga pada kesempatan ini penulis menyampaikan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Bapak Lutfi Rohman, S.Si., M.Si., sebagai Dosen Pembimbing Utama (DPU) dan Bapak Dr. Edy Supriyanto, S.Si., M.Si. Dosen Pembimbing Anggota (DPA) yang telah meluangkan waktu, pikiran, dan perhatian beliau guna memberikan bimbingan dan pengarahan pada kami dalam menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi ini;
2. Bapak Drs. Yudha Cahyoargo Hariadi, M.Sc, Ph.D., selaku Dosen Penguji I dan Ibu Nurul Priyantari, S.Si. M.Si., selaku Dosen Penguji II, atas semua nasihat, masukan, dan saran yang telah diberikan;
3. seluruh dosen di Fakultas MIPA yang telah dengan sabar membimbing dan memberikan ilmu yang sangat berharga;

4. Ayah dan Ibu tercinta yang telah dengan ikhlas memberikan dukungan dan doanya dalam setiap hembusan nafasnya;
5. Mohammad Ghoutsul Kafi, S.Si. dan Mohammad Rofiq, S.Si. yang telah dengan sabar memberikan bimbingan tentang pemrograman ALPS;
6. seluruh staf dan karyawan di Jurusan Fisika dan Fakultas MIPA, kami ucapkan terima kasih atas segala bantuan yang telah diberikan;
7. Lisa Iriani, Yanies Rismaya, dan Angga Septian, yang telah banyak memberikan dukungan dan semangat selama waktu penelitian;
8. Wahyu, Fikru, Ajeng, Adek, Jalal, dan semua teman-teman di Jurusan Fisika angkatan 2004 hingga 2009;
9. Neny, Ayu, Lia, dan semua teman-teman kos “Kaldema”, yang telah bersama-sama melewati suka dan duka, serta memberikan semangat dan dukungannya;
10. teman-teman Mawapres angkatan 2009 dan 2010 yang telah banyak memberikan motivasi, semangat, dan dukungan selama penelitian.
11. serta semua pihak yang tidak dapat kami sebutkan satu persatu, terimakasih kami ucapkan kepada mereka atas semua gagasan yang mereka berikan dalam setiap diskusi sehingga membantu dalam penulisan skripsi ini;

Kami menyadari bahwa kami adalah manusia yang jauh dari sempurna sehingga senantiasa mengharapkan saran dan masukan dari semua pihak agar dapat menyempurnakan tulisan dalam skripsi ini. Kami berharap semoga tulisan ini dapat memberikan manfaat bagi semua pihak, baik bagi penulis maupun para pembaca, serta bagi disiplin ilmu Fisika.

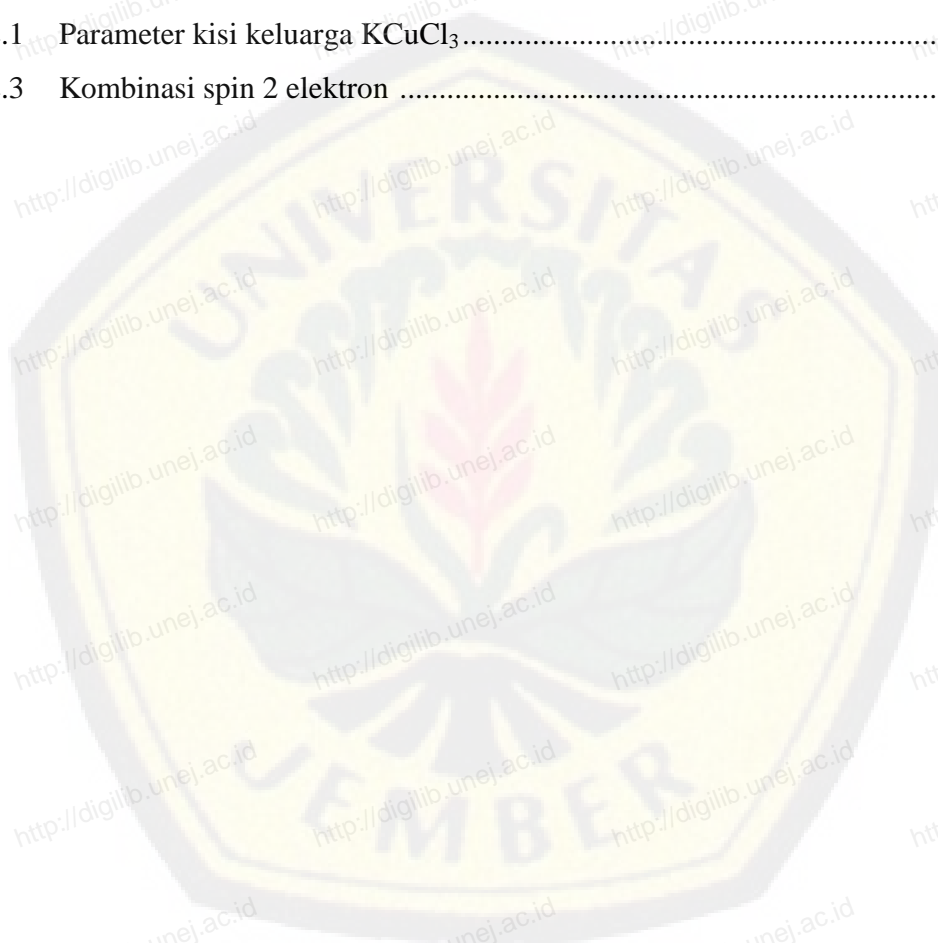
DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
PERSEMBAHAN	ii
MOTTO	iii
PERNYATAAN	iv
HALAMAN PEMBIMBINGAN	v
PENGESAHAN	vi
RINGKASAN	vii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xvi
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	5
1.5 Manfaat Penelitian	5
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Struktur Kristal NH_4CuCl_3	6
2.2 Sifat Magnetis NH_4CuCl_3	9
2.3 Hamiltonian Spin Model Heisenberg	11
2.4 ALPS (<i>Algorithms and Libraries for Physics Simulation</i>)	17
2.5 Kalibrasi Pemrograman Xml-ALPS untuk Hamiltonian Heisenberg dan Model <i>Two-Legs Zig-Zag Ladder</i>	19

2.6	Pemrograman ALPS untuk Pemodelan <i>Two-Legs Zig-Zag Ladder</i>	20
2.7	Simulasi Sifat Magnetis dan Energi Interaksi	22
BAB 3.	METODE PENELITIAN.....	26
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian.....	26
3.2	Prosedur Kerja	26
3.2.1	Instalasi Librari dan <i>Software</i> ALPS dalam GNU LINUX (Sistem 64 Bit)	26
3.2.2	Persiapan Simulasi Sifat Dasar Magnetis NH_4CuCl_3	27
3.2.3	Menjalankan Simulasi	28
3.2.4	Analisis Data	29
3.2.5	Diagram Penelitian	30
3.2.6	Diagram Alir Proses Simulasi	31
BAB 4.	HASIL DAN PEMBAHASAN	32
4.1.....	H amiltonian Spin Model Heisenberg pada Pemodelan <i>Two-Legs Zig-Zag Ladder</i> dalam Program xml – ALPS.....	32
4.2.....	S imulasi Sifat Suseptibilitas Magnetis dan Energi Interaksi Spin Bahan NH_4CuCl_3 dengan Metode <i>Quantum Monte Carlo</i> (QMC).....	33
4.3	Simulasi DMRG Untuk Sifat Magnetisasi Dalam Medan Eksternal Pemodelan <i>Two-Legs Zig-Zag Ladder</i> Pada Suhu 0,5 K.....	39
BAB 5.	KESIMPULAN DAN SARAN.....	44
5.1	Kesimpulan	44
5.2	Saran.....	45
DAFTAR PUSTAKA		46
LAMPIRAN – LAMPIRAN.....		50

DAFTAR TABEL

	Halaman
2.1 Parameter kisi keluarga $KCuCl_3$	8
2.3 Kombinasi spin 2 elektron	12

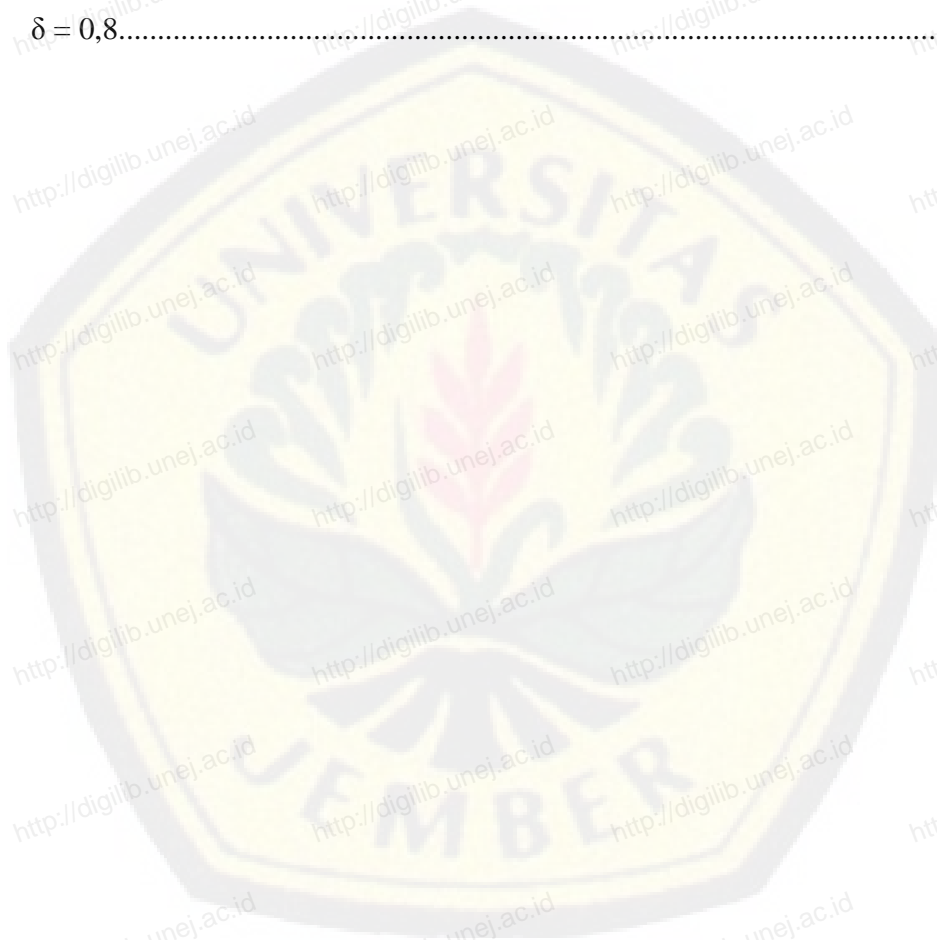


DAFTAR GAMBAR

	Halaman
2.1 Struktur molekul senyawa ABX_3	6
2.2 Struktur kristal NH_4CuCl_3 pada temperatur ruang (Ruang Grup $P2_1/c$)	7
2.3 Struktur rantai ganda, orbital hole $d(x^2 - y^2)$ dari ion Cu^{2+} dan perubahan interaksinya	8
2.4 Kurva susceptibilitas bahan antiferromagnet	10
2.5 Kurva magnetisasi NH_4CuCl_3 diukur pada suhu 0,5 K	11
2.6 Kurva magnetisasi bebas temperatur pemodelan <i>two-legs zig-zag ladder</i> dengan konstanta kopling $J_1=1, J_2=2$ dan ukuran sistem $N=50$ spin	20
2.7 Pemodelan <i>Two Leg Zig-Zag Ladder</i> dalam 1 Dimensi	22
2.8 Kurva Magnetisasi <i>Two Leg Zig Zag Ladder</i> dengan Hamiltonian 2.11 Ukuran Sistem $N = 48$	24
3.1 Diagram Penelitian	30
3.2 Diagram alir Proses Simulasi	31
4.1 Profil pemodelan kisi <i>two-legs zig-zag ladder</i> yang akan diprogramkan pada <i>ALPS lattice xml</i>	32
4.2 Kurva suseptibilitas magnetik terhadap temperatur pada bahan NH_4CuCl_3 dengan konstanta kopling $J_1=1$ dan $J_2=2$ dengan jumlah sistem spin $N=48$ dan $\delta = 0,7$ dan $\delta = 0,8$	35
4.4 Kurva suseptibilitas magnetik terhadap temperatur pada bahan NH_4CuCl_3 dengan konstanta kopling $J_1=2$ dan $J_2=4$ dengan jumlah sistem spin $N=48$ dan $\delta = 0,7$ dan $\delta = 0,8$	37

4.5 Kurva energi interaksi terhadap temperatur pada bahan NH_4CuCl_3 dengan konstanta kopling $J_1=2$ dan $J_2=4$ dengan jumlah sistem spin $N=48$ dan $\delta = 0,7$ dan $\delta = 0,8$ 38

4.6 Kurva magnetisasi temperatur pada bahan NH_4CuCl_3 dengan konstanta kopling $J_1=2$ dan $J_2=4$ dengan jumlah sistem spin $N=48$ dan $\delta=0,7$ dan $\delta = 0,8$ 40



DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
A.	PRO
GRAM xml-ALPS	50
A.1 Program xml Untuk Mendeskripsikan Hamiltonian Heisenberg.....	50
A.2 Program xml Untuk Mendefinisikan Kisi Terbatas dengan $N= 48$ spin	52
B.	PAR
AMETER SIMULASI DALAM PLAIN TEXT	53
B.1 Simulasi QMC untuk Suseptibilitas Magnetik dan Energi Interaksi.....	53
B.2 Simulasi DMRG untuk Magnetisasi pada Medan Eksternal.....	57
C.	PRO
GRAM PARAMETER PLOT DALAM FORMAT xml	57
C.1 Plot Suseptibilitas Magnetik vs Temperatur.....	57
C.2 Plot Magnetisasi vs Medan Magnet Eksternal.....	57
C.3 Plot Energi Interaksi vs Temperatur	58
D.	CON
TOH PENDEFINISIAN KISI TERBATAS DALAM FORMAT XML-ALPS	
.....	58