

**SIMULASI TEMPERATUR TRANSISI
SUPERKONDUKTOR $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$
DENGAN MODEL ASYNNNI**

TESIS

**MADALI
0606001374**



**PROGRAM STUDI ILMU FISIKA
PASCASARJANA FMIPA
UNIVERSITAS INDONESIA**

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Material superkonduktor Nd - Ba - Cu - O sangat berperan penting dalam pencarian temperatur transisi yang tinggi. Dengan konsentrasi tertentu, maka superkonduktor ini dapat dirumuskan sebagai $\text{Nd}_{1+y}\text{Ba}_{2-y}\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ [1]. Temperatur transisi senyawa ini berkisar antara 12 K sampai 30 K [2].

Tinggi rendahnya temperatur transisi antara keadaan superkonduktor dan non superkonduktor sangat dipengaruhi oleh konsentrasi kandungan oksigen x . konsentrasi kandungan oksigen ini berkisar antara $0 < x < 1$ [3, 4, 5, 6, 7]. Selain dipengaruhi oleh kandungan oksigen, juga dipengaruhi oleh pengaturan penempatan oksigen pada bidang CuO [8]. Pengaturan penempatan oksigen pada bidang CuO dilakukan dengan membuat keadaan acak yang peluangnya masih bisa diterima. Beberapa model yang menggambarkan keadaan ini telah diajukan. Salah satu model yang sukses adalah model ASYNNNI (Asymetri Next Nearest Neighbour Interaction) [9, 10]. Model ASYNNNI ini digunakan dalam membuat program simulasi komputer yang dapat menunjukkan temperatur transisi dari senyawa $\text{Nd}_{1+y}\text{Ba}_{2-y}\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Dalam simulasi ini, yang dirubah adalah kandungan oksigennya. Kandungan oksigen ini ditandai dengan nilai x , sedangkan kandungan Nd dan Ba tetap yaitu dengan menetapkan harga $y = 0$. sehingga rumus senyawa dalam simulasi adalah $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$.

Temperatur transisi yang sudah didapatkan masih jauh di bawah suhu kamar. Penelitian terus dilakukan supaya didapatkan temperatur transisi pada suhu kamar. Dengan bertambahnya kandungan oksigen, maka temperatur transisi yang didapatkan juga bertambah. Keadaan ini menjadi dasar untuk menambah jumlah bidang CuO sehingga kandungan oksigennya akan terus bertambah dengan harapan mendapatkan temperatur transisi yang lebih tinggi.

Dari hasil simulasi komputer dengan menggunakan model ASYNNNI, dapat digambarkan grafik kalor jenis terhadap temperatur. Sifat umum dari superkonduktor yaitu terjadi lonjakan kalor jenis pada temperatur transisinya.

Pada senyawa yang tidak bersifat superkonduktor, maka kalor jenis yang didapatkan tidak mengikuti sifat tersebut.

1.2 Pembatasan Masalah

Dalam penelitian ini, dilakukan pembatasan dengan:

1. Memperhitungkan interaksi antar atom oksigen yang terletak pada bidang CuO.
2. Memperhitungkan interaksi antara atom oksigen antar bidang CuO.
3. Menghitung besaran kalor jenis.
4. Menitikberatkan pada Neodymium dengan satu bidang CuO

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah menghasilkan simulasi komputer yang dapat memperlihatkan dengan jelas:

1. Kalor jenis sebagai fungsi temperatur.
2. Temperatur transisi untuk senyawa $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ dengan kandungan oksigen yang berbeda-beda.
3. Membuktikan bahwa untuk senyawa yang mempunyai dua bidang CuO dan tiga bidang CuO tidak bersifat superkonduktor.

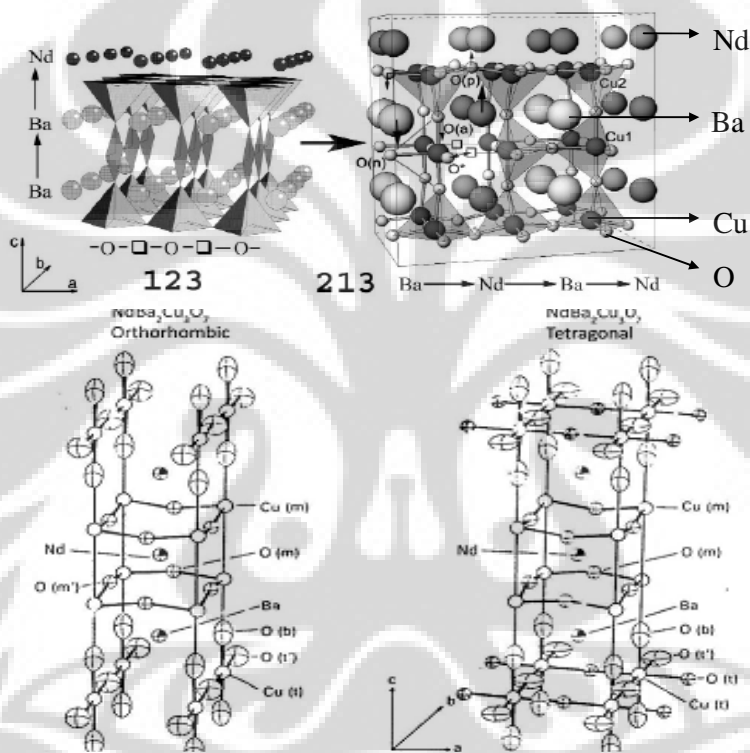
1.4 Sistematika Penulisan

Tesis ini terdiri dari enam BAB. BAB I menjelaskan gambaran ringkas superkonduktor $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, model SYNNNI, pembatasan masalah, tujuan penelitian dan sistematika penulisan. BAB II menjelaskan struktur dasar kristal $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ dan bidang CuO superkonduktor $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. BAB III menjelaskan pengertian model ASYNNNI, Hamiltonian interaksi dan perbandingan antara model Ising dan model ASYNNNI. BAB IV menjelaskan tentang metode Monte Carlo, algoritma metropolis dan Dinamika Glauber. BAB V memuat hasil simulasi dan pembahasannya. BAB VI berisi kesimpulan dan saran.

BAB II SIMULASI RISTAL $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$

2.1 Struktur Dasar

Secara umum, superkonduktor neodmium mempunyai rumus senyawa $\text{Nd}_{1+y}\text{Ba}_{2-y}\text{Cu}_3\text{O}_z$ [11]. Untuk nilai $y = 0$ dan $z = 7$, diberi kode 123 dan untuk nilai $y = 1$ dan $z = 7$, diberi kode 213. Gambar 2.1 menunjukkan struktur superkonduktor neodmium untuk 123 dan 213.



Gambar 2.1. Struktur $\text{Nd}_{1+y}\text{Ba}_{2-y}\text{Cu}_3\text{O}_z$ 123 dan 213

Pada awalnya kode 123 sistem kristalnya merupakan tetragonal. Setelah divariasikan oksigennya maka untuk kandungan oksigen $0,1 < x < 0,7$ sistem kristalnya ortorombik dan kandungan oksigen untuk $x = 0,8$ dan $x = 0,9$ berbentuk tetragonal. Struktur tetragonal tidak bersifat superkonduktor, sedangkan struktur ortorombik bersifat superkonduktor. Struktur $\text{Nd}_{1+y}\text{Ba}_{2-y}\text{Cu}_3\text{O}_z$ mempunyai parameter kisi yang berbeda-beda seperti pada Tabel 2.1 [1].

Tabel 2.1. Parameter kisi untuk senyawa $\text{Nd}_{1+y}\text{Ba}_{2-y}\text{Cu}_3\text{O}_z$

No	Kode	Parameter kisi (Å)
1	123	a = 3.916, b = 3.858, c = 11.754
2	213	a = 7.902, b = 3.8738, c = 23.468

2.2 Bidang CuO Superkonduktor $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$

Bidang CuO merupakan lapisan yang berperan dalam sifat superkonduktor. Pada bidang ini, atom tembaga dikelilingi oleh empat atom oksigen. Panjang ikatan CuO ini adalah 0.190 – 0.197 nm. Sedangkan jarak antara atom tetangga terdekat adalah 0.380 – 0.394 nm. Atom tembaga juga dapat mengikat atom oksigen yang berada pada lapisan tetangganya. Panjang ikatan ini adalah 0.22 nm. Karena ikatannya lebih panjang dibandingkan dengan ikatan CuO, maka ikatan pada bidang CuO lebih kuat jika dibandingkan dengan ikatan CuO yang berada di atasnya [11]. Keadaan posisi oksigen terisi ataupun kosong pada bidang CuO akan berpengaruh pada sifat dari senyawa $\text{Nd}_{1+y}\text{Ba}_{2-y}\text{Cu}_3\text{O}_z$. Keadaan superkonduktor dan non superkonduktor bergantung pada konsentrasi oksigen.

Arus super mengalir pada lapisan konduksi bidang CuO_2 . Tiap-tiap ion tembaga (Cu^{2+}) dikelilingi oleh empat ion oksigen (O^{2-}). Pada keadaan normal di atas temperatur transisi, elektron konduksi dilepaskan oleh atom tembaga. Elektron ini bergerak disekitar bidang CuO sehingga menimbulkan arus listrik. Pada keadaan superkonduktor di bawah temperatur transisi, elektron yang dilepaskan oleh atom tembaga membentuk pasangan elektron (*Cooper pairs*) [12]. Interaksi antara elektron dengan elektron menyebabkan interaksi tolak-menolak yang biasa disebut dengan gaya Coulomb. Interaksi elektron-ponon [13] akan menyebabkan interaksi tarik-menarik. Pada keadaan superkonduktor, interaksi antara elektron-ponon lebih besar daripada interaksi Coulomb. Sehingga gaya total yang bekerja antar elektron adalah tarik menarik. Keadaan ini menyebabkan pasangan elektron (*Cooper pairs*) yang dapat bergerak bebas tanpa hambatan.

2.3 Model ASYNNNI

ASYNNNI adalah singkatan dari Asymmetric Next-Nearest-Neighbour Interaction. Dimana model ini memperhitungkan interaksi antar atom oksigen dengan tetangga terdekat dan dengan tetangga terdekat berikutnya. Kekuatan

interaksi antara atom oksigen ini ditandai dengan besarnya potensial antar atom oksigen. Potensial antar interaksi atom oksigen ini besarnya tidak sama ke semua arah, sehingga disebut asyetric.

Model ASYNNNI memperhitungkan keadaan acak dari atom-atom oksigen yang terletak pada suatu bidang dengan posisi tertentu [14]. Keadaan acak yang diperhitungkan yaitu oksigen yang terletak pada bidang CuO. Masing-masing oksigen memiliki interaksi dengan atom oksigen tetangganya. Ada 4 jenis atom oksigen tetangga yaitu atom tetangga terdekat (*nearest neighbour*), atom tetangga setelah tetangga terdekat (*next nearest neighbour*) yang dijematani oleh kekosongan (*vacancie*), atom tetangga setelah tetangga terdekat (*next nearest neighbour*) yang dipisahkan oleh atom Cu dan atom oksigen pada posisi bidang basal yang berdampingan. Oksigen dengan tetangga terdekatnya memiliki interaksi tertentu. Interaksi antara pasangan oksigen digambarkan dengan parameter interaksi V_1 , V_2 , V_3 dan V_4 . V_1 merupakan interaksi tolak-menolak antara oksigen dengan tetangga terdekatnya. Interaksi ini merupakan interaksi terkuat yang menghubungkan dua sub kisi. V_2 merupakan interaksi tarik-menarik antara oksigen dengan tetangga setelah tetangga terdekat yang diselingi atom Cu. Interaksi ini juga menghubungkan dua sub kisi yang sama. V_3 merupakan interaksi tolak-menolak antara oksigen dengan tetangga setelah tetangga terdekat yang diselingi daerah kekosongan. Interaksi ini juga menghubungkan dua sub kisi yang sama. V_4 merupakan interaksi tarik-menarik antara pasangan oksigen yang terletak pada bidang CuO dalam arah vertikal di atas dan di bawahnya.

2.4 Hamiltonian Interaksi

Untuk menghitung energi dari berbagai keadaan, digunakan Hamiltonian interaksi. Hamiltonian model ASYNNNI tiga dimensi adalah [15]

$$H = V_1 \sum_{\langle rr' \rangle}^{NN} \sigma(r)\sigma(r') - V_2 \sum_{\langle rr' \rangle}^{NNCu} \sigma(r)\sigma(r') + V_3 \sum_{\langle rr' \rangle}^{NNV} \sigma(r)\sigma(r') - V_4 \sum_{\langle rr' \rangle}^{NNPI} \sigma(r)\sigma(r') \quad (1)$$

Dimana V_1 , V_2 , V_3 dan V_4 adalah parameter interaksi antara atom oksigen dengan tetangganya yaitu tetangga terdekat dan tetangga terdekat berikutnya. Sedangkan

$\sigma(r)$ adalah variabel keterisian, berharga nol jika tidak terisi oksigen dan berharga satu jika terisi oksigen. Suku pertama pada persamaan (1) merupakan penjumlahan seluruh pasangan oksigen antar tetangga terdekatnya, suku kedua merupakan penjumlahan seluruh pasangan oksigen antar tetangga terdekat berikutnya yang dipisahkan oleh atom Cu, suku ketiga merupakan penjumlahan seluruh pasangan oksigen antar tetangga terdekat berikutnya yang dipisahkan oleh kekosongan sedangkan suku keempat merupakan penjumlahan seluruh pasangan oksigen antar tetangga terdekat berikutnya yang berada di atasnya pada bidang CuO. Pada bidang CuO, karena tiap atom memiliki 4 atom tetangga terdekat dan 2 tetangga setelah tetangga terdekat baik yang dipisahkan oleh atom Cu atau oleh kekosongan, maka harga masing-masing penjumlahan yang meliputi seluruh pasangan oksigen $\langle rr' \rangle$, yang merupakan tetangga terdekat (nearest neighbour) atau tetangga terdekat berikutnya (next nearest neighbour) adalah:

$$\sum_{\langle rr' \rangle}^{NN} \sigma(r)\sigma(r') = 0,1,2,3,4$$

$$\sum_{\langle rr' \rangle}^{NNCu} \sigma(r)\sigma(r') = 0,1,2$$

$$\sum_{\langle rr' \rangle}^{NNNV} \sigma(r)\sigma(r') = 0,1,2$$

$$\sum_{\langle rr' \rangle}^{NNPI} \sigma(r)\sigma(r') = 0,1,2,3,4$$

Hamiltonian pada persamaan (1) digunakan untuk menghitung energi dalam U dan kalor jenis C yang masing-masing dirumuskan sebagai berikut [16]

$$U = \frac{1}{N} \langle H \rangle \quad (2)$$

$$C = \frac{N}{(k_B T)^2} (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2) \quad (3)$$

2.5 Perbandingan Model ASYNNNI dan Model Ising

Sebagaimana telah diungkapkan sebelumnya, model ASYNNNI merupakan pengembangan dari model Ising. Secara ringkas perbandingan model Ising untuk feromagnetik dengan model ASYNNNI adalah sebagai berikut [9, 15, 16]:

Tabel 3.1 Perbandingan model ASYNNNI dan model Ising.

	Model Ising	Model ASYNNNI
Hamiltonian	$E\{s_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle}^{zN/2} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i$	$H = V_1 \sum_{\langle rr' \rangle}^{NN} \sigma(r) \sigma(r') - V_2 \sum_{\langle rr' \rangle}^{NNNCu} \sigma(r) \sigma(r') \\ + V_3 \sum_{\langle rr' \rangle}^{NNNV} \sigma(r) \sigma(r') - V_4 \sum_{\langle rr' \rangle}^{NNPI} \sigma(r) \sigma(r')$
Konstanta	Rapat arus (J) dan medan magnet H	Parameter interaksi V_1, V_2, V_3 dan V_4
Variabel	Variabel spin: $s_i = 1$, jika spin up $s_i = -1$, jika spin down	Variabel keterisian posisi: $\sigma(r) = 0$, tidak terisi oksigen $\sigma(r) = 1$, terisi oksigen
Jenis Interaksi	Homogen untuk semua tetangga	Berbeda-beda untuk arah yang berbeda

2.6 Metode Monte Carlo

Suatu sistem yang terdiri dari keadaan acak, dimana dengan perlakuan tertentu menimbulkan perubahan keadaan acak dengan berubahnya waktu dapat disimulasikan dengan menggunakan metode monte carlo. Keadaan sistem yang acak dapat dimunculkan selama berjalannya simulasi. Keadaan acak ini diusahakan mendekati sistem yang nyata sehingga selama simulasi tidak didapatkan keadaan acak yang berulang. Misalnya dalam sebuah kisi kristal, partikel dapat disebarkan secara acak sesuai dengan konsentrasinya dimana jumlah partikel yang akan menempati kisi tersebut tidak melebihi tempat yang sudah tersedia. Dengan demikian maka akan terbentuk keadaan acak antara posisi terisi dan kosong. Sistem-sistem fisika yang lain yang dapat disimulasikan dengan metode Monte Carlo misalnya gerakan acak partikel dalam fluida (gerak Brown), keadaan acak spin dalam material magnetik, campuran logam dan sebagainya.

. Dalam metode Monte Carlo keadaan partikel disebarkan secara acak dengan menggunakan bilangan random yang dihasilkan oleh komputer. Bilangan random yang digunakan diusahakan bilangan random yang tidak menghasilkan keadaan acak yang berulang. Untuk sistem yang sangat besar misalnya terdiri dari

banyak partikel, diperlukan kemampuan komputer yang memadai. Simulasi akan lebih cepat dan lebih baik jika menggunakan komputer yang mempunyai kapasitas CPU dan memori yang besar. Selain kemampuan komputer yang bagus diperlukan juga pemrograman yang efisien khususnya dalam menggunakan memori. Selain pemrograman yang efisien, algoritma yang digunakan juga mendukung untuk memperoleh hasil yang bagus. Algoritma yang digunakan dalam pemrograman disesuaikan dengan kebutuhan. Dalam simulasi Monte Carlo sekarang ini digunakan algoritma metropolis.

Ciri dari simulasi Monte Carlo adalah menggunakan bilangan random untuk mensimulasi keadaan acak. Bilangan random yang digunakan dalam probabilitas adalah bilangan riil dengan jangkauan antara 0 sampai mendekati 1 ($0 \leq \text{bilangan random} < 1$). Bilangan ini dihasilkan oleh komputer dengan cara pengocokan (pengolahan angka), sehingga dihasilkan keluaran berupa bilangan riil yang berkisar antara 0 sampai mendekati 1 secara acak.

Secara teori banyaknya bilangan random (bilangan riil) antara 0 sampai mendekati 1 adalah tak terhingga, tetapi dalam program komputer, banyaknya bilangan random terbatas. Misalnya bila ada 1000 bilangan random, maka bilangan random tersebut berkisar dari 0.000 sampai 0.999. Salah satu bilangan random ini akan dimunculkan oleh komputer secara sembarang, seperti halnya dadu yang dilempar [17].

2.7 Algoritma Metropolis

Metode metropolis bekerja berdasarkan peluang transisi dari suatu keadaan ke keadaan berikutnya dimana peluang ini bergantung pada perbedaan energi antara keadaan awal dan keadaan berikutnya. Peluang keadaan berikutnya ini bergantung pada keadaan sebelumnya. Energi dari berbagai keadaan yang masih bisa diterima kemudian dirata-ratakan. Banyak faktor yang mempengaruhi dalam perhitungan dengan menggunakan algoritma metropolis diantaranya temperatur, ukuran kisi, syarat batas dan sebagainya. Model sistem fisika yang menggunakan algoritma metropolis diantaranya adalah model Ising dan model ASYNNNI.

Dalam model ASYNNNI, bila dalam sistem terdapat N buah posisi oksigen terisi atau kosong, maka jumlah keadaan yang mungkin adalah 2^N keadaan.

Menurut distribusi Boltzman, peluang untuk menemukan sebuah sistem dalam keadaan s dengan energi E_s dimana sistem tersebut kontak termal dengan sebuah reservoir besar pada temperatur T adalah

$$P = \frac{\exp\left(-\frac{E_s}{k_b T}\right)}{Z} \quad (5)$$

dimana

$$Z = \sum_s \exp\left(-\frac{E_s}{k_b T}\right) \quad (6)$$

Z adalah total seluruh keadaan atau fungsi partisi. Untuk harga N yang besar, Z akan sulit dihitung. Sebagai contoh untuk harga $N = 10 \times 10$, maka ada 2^{100} keadaan. Untuk mengurangi kesulitan ini, maka diperlukan rumusan yang akan menghitung sebagian keadaan saja tetapi sudah mewakili semua keadaan. Rumusan ini disebut metode Monte Carlo.

Dalam model ASYNNNI, konstanta posisi oksigen terisi atau kosong disebarkan secara sembarang dengan menggunakan bilangan random. Walaupun oksigen disebarkan secara sembarang, tetapi hanya keadaan yang dapat diterima saja yang akan diperhitungkan. Keadaan ini dapat diketahui dengan menghitung perbedaan energi atupun peluangnya. Banyaknya keadaan yang mungkin sangat bergantung pada posisi oksigen terisi atau kosong. Keadaan jumlah posisi terisi atau kosong ini sesuai dengan kandungan oksigen. Setelah peluangnya dihitung, kemudian dilakukan penyapuan dengan menggunakan algoritma metropolis.

Secara lengkap langkah-langkah algoritma metropolis adalah [18]:

1. Dilakukan langkah coba untuk mengubah keadaan awal S_1 dengan cara membuat keadaan baru S_2 yang berbeda posisi terisi dan kosong.
2. Dihitung $\Delta E = E_2 - E_1$.
3. Jika $\Delta E \leq 0$, maka langkah coba diterima dan dilanjutkan kelangkah 8.
4. Jika $\Delta E > 0$, maka dihitung probabilitas $p = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_b T}\right)$.
5. Kemudian dimunculkan bilangan random r oleh komputer.

6. Jika $r \leq p$, maka dianggap peluang keadaan dari langkah coba lebih besar daripada keadaan sebelumnya, sehingga langkah coba diterima dan dilanjutkan kelangkah 8. Jika $r > p$, maka langkah coba ditolak.
7. Diulangi langkah 2 sampai 6 untuk kemungkinan keadaan berikutnya, sampai seluruh keadaan dijelajahi.
8. Selanjutnya dihitung kuantitas fisika yang diinginkan (energi dan kalor jenis).
9. Diulangi langkah 2 sampai 8 sehingga jumlah sampel mencukupi.
10. Kemudian semua kuantitas sampel diperhitungkan.

2.8 Dinamika Glauber

Keadaan-keadaan acak yang masih dapat diterima didasarkan pada perubahan energi antara keadaan awal dan keadaan berikutnya, dimana perubahan energi ini akan berpengaruh juga pada peluang yang akan dihitung. Hasil perhitungan peluang selanjutnya dibandingkan dengan bilangan random yang muncul. Jika peluang yang dihitung lebih besar dari bilangan random yang muncul, maka keadaan berikutnya masih dapat diterima. Sebaliknya jika peluang yang dihitung lebih kecil dibandingkan dengan bilangan random yang muncul, maka keadaan berikutnya ditolak. Peluang yang dihitung dengan persamaan

$$p = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_b T}\right)$$

hanya berlaku untuk temperatur yang rendah. Peluang ini

didapatkan dari sistem klasik. Pada temperatur rendah, sistem akan mengikuti sistem klasik sehingga digunakan probabilitas untuk sistem klasik. Sedangkan pada temperatur yang tinggi, nilai yang didapatkan selalu mendekati 1 sehingga peluang yang dihitung nilainya selalu lebih besar dibandingkan dengan bilangan random yang muncul. Keadaan ini menyebabkan semua keadaan acak akan selalu diterima. Untuk mengatasi keadaan ini digunakan persamaan peluang yang lebih umum. Peluang ini tentunya harus berlaku untuk temperatur tinggi dan temperatur rendah. Peluang yang berlaku untuk semua nilai temperatur dinamakan probabilitas Glauber [16].

$$p = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh\left(\frac{\Delta H}{2k_b T}\right) \right) \quad (7)$$

dimana p adalah peluang, ΔH adalah perubahan energi antara keadaan awal dan keadaan berikutnya, k_b adalah konstanta Boltzman dan T adalah temperatur yang digunakan. Temperatur ini besarnya diubah-ubah sesuai dengan perlakuan yang diinginkan.



BAB III

MEKANISME INPUT DATA DAN RUNNING PROGRAM

3.1 Input Data

Langkah awal dalam simulasi yaitu memasukan ukuran kisi dalam arah x yang ditandai dengan Nx, pada arah y ditandai dengan Ny dan arah z ditandai dengan Nz. Selanjutnya menentukan jumlah sweep dan jumlah grupnya, lalu memilih harga x untuk kandungan oksigen yang berbeda-beda. Untuk $x = 1$, ini menunjukkan kandungan oksigen 90% dan dalam penulisan $x = 0,1$. untuk $x = 2$, di dalam program menunjukkan kandungan oksigen 80% dan dalam penulisan $x = 0,2$. untuk $x = 3$, di dalam program menunjukkan kandungan oksigen 70% dan penulisannya $x = 0,3$. sampai $x = 9$ yang menunjukkan kandungan oksigen 10% dan dalam penulisannya $x = 0,9$.

Langkah selanjutnya memasukkan temperatur awal (T minimum), rentang temperatur (delta T) dan jumlah variasi. Setelah semua parameter dimasukkan, maka program dijalankan dengan menekan tombol enter.

3.2 Running Program

Untuk $ivar = 1$ (temperatur awal), oksigen disebarkan secara acak pada bidang CuO dengan menggunakan bilangan random. Ini menunjukkan keadaan awal yang akan dihitung energi awalnya (E_1). Untuk grup = 1 menunjukkan salah satu oksigennya dipindahkan secara acak (ini merupakan langkah coba) lalu dihitung energinya sebagai energi berikutnya (E_2). Selisih antara E_2 dan E_1 adalah ΔE . Jika $\Delta E \leq 0$, maka langkah coba diterima kemudian dihitung jumlah energinya. Tetapi jika $\Delta E > 0$, maka dihitung probabilitas p . Langkah selanjutnya dimunculkan bilangan random r oleh komputer. Jika $p \geq r$, maka dianggap peluang dari langkah coba diterima kemudian dihitung jumlah energinya. Jika $p < r$, maka langkah coba ditolak selanjutnya oksigen dipindahkan sampai sweep ke- n ($n = 30$). Setiap keadaan yang diterima, dihitung jumlah energi dan rata-ratanya.

Keadaan berikutnya didapatkan dengan memilih oksigen secara acak dan keadaan ini menunjukkan grup = 2 sampai grup ke- n ($n = 30$). Setelah semua langkah terpenuhi, maka dihitung kalor jenisnya.

Langkah yang sama digunakan untuk menghitung pada temperatur berikutnya sampai i var = n ($n = 9$). Setelah semua langkah terpenuhi, maka hasilnya ditampilkan dalam bentuk tabel temperatur dan kalor jenis. Dari tabel ini, dapat digambarkan grafik antara temperatur dan kalor jenis. Grafik dalam penelitian ini didapatkan dengan menggunakan *microsoft excel*.



BAB IV HASIL SIMULASI DAN PEMBAHASAN

4.1 Lonjakan Kalor Jenis pada Temperatur Transisi

Sifat umum dari superkonduktor adalah terjadinya lonjakan kalor jenis pada temperatur transisi T_c [19, 20, 21]. Kalor jenis ini dapat dihitung pada keadaan volume tetap C_v . Sedangkan pada pengukuran, Kalor jenis ini diukur pada keadaan tekanan C_p . Pada temperatur rendah, Perbedaan antara C_v dan C_p sangat kecil sehingga dapat diabaikan [22].

Transisi dari keadaan normal ke keadaan superkonduktor merupakan transisi fase orde kedua yaitu perubahan fasa pada volume tetap, tetapi kalor jenisnya berubah. Perubahan fasa antara keadaan superkonduktor dan non superkonduktor terjadi pada temperatur transisi. Pada keadaan superkonduktor, mempunyai fasa struktur orthorombik dan pada keadaan non superkonduktor mempunyai fasa struktur tetragonal [23, 29, 25, 26, 27].

Hasil simulasi temperatur transisi senyawa $\text{NdBa}_2\text{O}_{7-x}$ telah menunjukkan adanya beberapa temperatur transisi. Temperatur-temperatur transisi ini didapatkan dengan mengubah-ubah kandungan oksigennya. Besarnya temperatur transisi dapat dilihat pada grafik kalor jenis terhadap temperatur. Pada grafik dapat dilihat bahwa diskontinuitas kalor jenis didapatkan ketika terjadi lonjakan kalor jenisnya. Besarnya temperatur transisi didapatkan ketika terjadi lonjakan kalor jenis pada temperatur tersebut.

Ukuran kisi dalam arah x , arah y dan arah z adalah N_x , N_y dan N_z . Parameter interaksinya adalah V_1 , V_2 , V_3 dan V_4 . Dalam program nsweep adalah banyaknya pemindahan tiap atom oksigen secara acak (sweep) dan ngroup adalah banyaknya atom oksigen yang dipindahkan secara acak (grup). Kandungan oksigen adalah x (didalam program variabelnya adalah Besarx). Untuk kandungan oksigen 90%, maka di dalam program dimasukkan Besarx = 1. ini menunjukkan bahwa $x = 0,1$. Variabel dalam program untuk perubahan temperatur adalah delta T (ΔT). Gambar 4.1 dan 4.2 adalah grafik hasil simulasi untuk senyawa $\text{NdBa}_2\text{O}_{7-x}$ dengan kandungan oksigen 90% dan 80%.

Masukan:

$N_x = 70, N_y = 70, N_z = 20$

$V_1 = 0.150 \text{ eV}$

$V_2 = 0.114 \text{ eV}$

$V_3 = 0.032 \text{ eV}$

$V_4 = 0.000 \text{ eV}$

grup = 30

sweep = 30

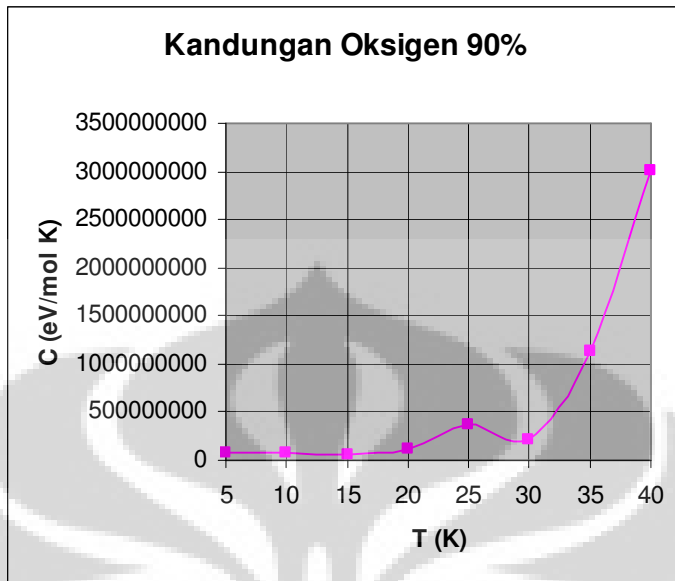
kb = 8.125e-05

x = 0,1

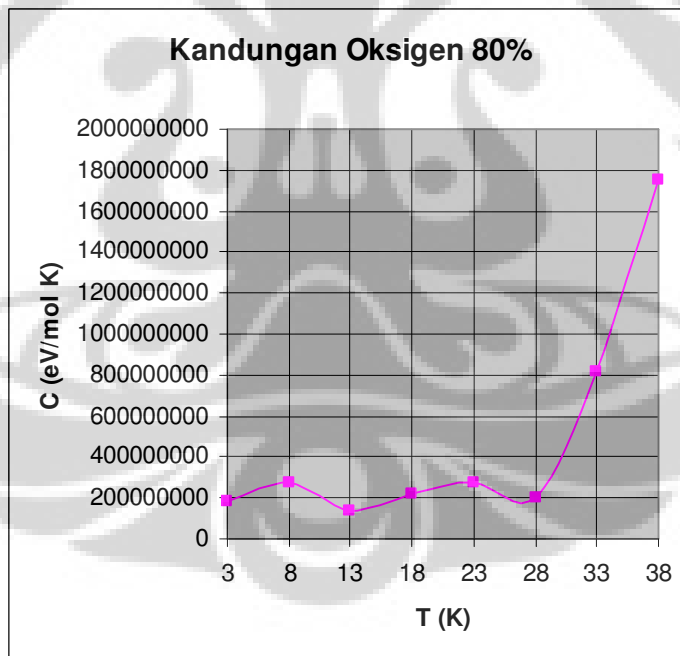
$\Delta T = 5 \text{ K}$

Parameter masukkan untuk N_x, N_y, N_z , grup dan sweep disesuaikan dengan kemampuan komputer dalam perhitungan. Jika ukuran sistem yang digunakan melebihi nilai tersebut, maka program komputer tidak dapat dijalankan. Pada penelitian ini digunakan komputer dengan procesor 1,4 GB dan memory sebesar 256 MB. Parameter masukkan untuk V_1, V_2, V_3 dan V_4 dipilih sehingga didapatkan keluaran yang sesuai dengan eksperimen. Harga x disesuaikan dengan kandungan oksigen yang digunakan dan perubahan suhu ΔT pada penelitian ini adalah 5 K. Jika lebih kecil atau lebih besar dari 5 K, maka akan susah menentukan lonjakan kalor jenisnya. Jika lebih kecil dari 5 K, maka akan banyak lonjakan yang didapatkan sedangkan jika lebih besar akan susah mendapatkan lonjakkannya.

Grafik gabungan ada di lampiran 1. garis yang menghubungkan antar titik berfungsi untuk memudahkan melihat lonjakan kalor jenis. Sedangkan titik-titiknya merupakan hasil dari simulasi.

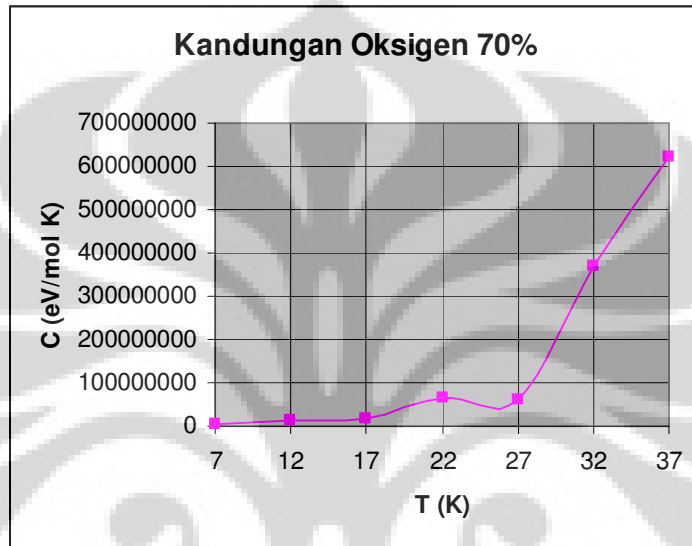


Gambar 4.1. Grafik kalor jenis terhadap temperatur dengan temperatur transisi 30 K

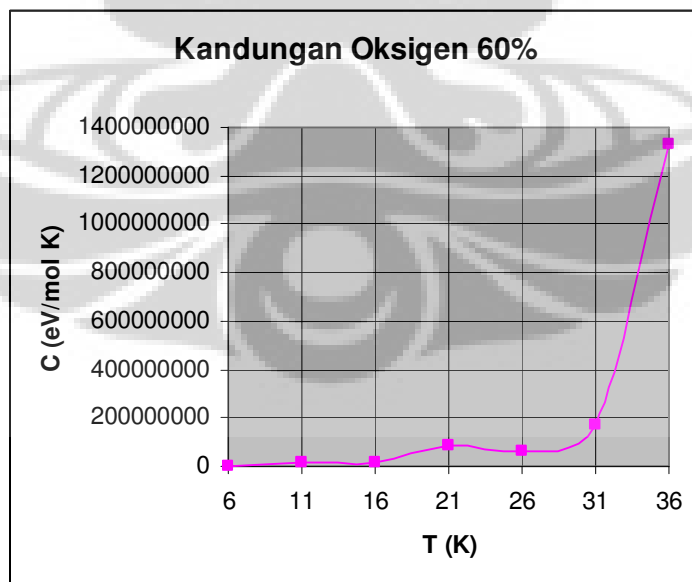


Gambar 4.2. Grafik kalor jenis terhadap temperatur dengan temperatur transisi 28 K

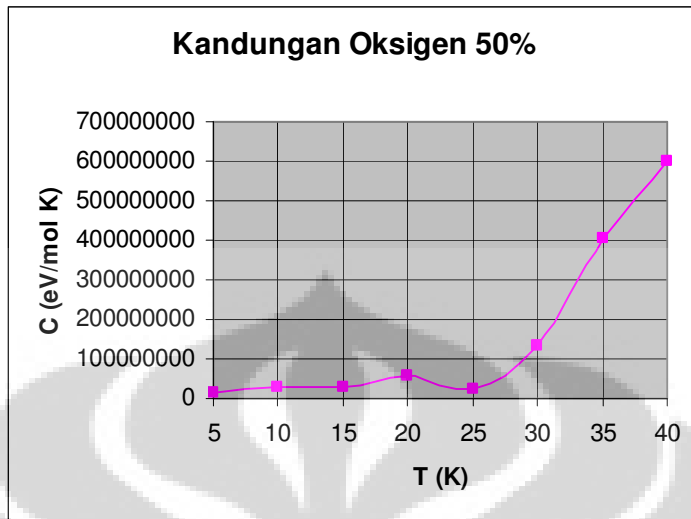
Untuk $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ dengan kandungan oksigen 80%, masukannya sama seperti pada $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ dengan kandungan oksigen 90% hanya berbeda pada nilai x . Untuk kandungan oksigen 80%, maka dalam program $\text{Besarx} = 2$. ini menunjukkan bahwa $x = 0,2$. Untuk kandungan oksigen 70%, 60% dan 50% maka $x = 0,3$, $x = 0,4$ dan $x = 0,5$



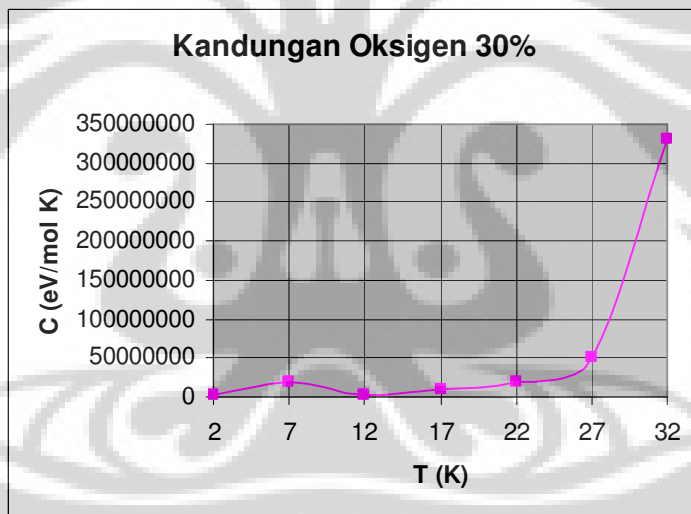
Gambar 4.3. Grafik kalor jenis terhadap temperatur dengan temperatur transisi 27 K



Gambar 4.4. Grafik kalor jenis terhadap temperatur dengan temperatur transisi 26 K



Gambar 4.5. Grafik kalor jenis terhadap temperatur dengan temperatur transisi 25 K



Gambar 4.6. Grafik kalor jenis terhadap temperatur dengan temperatur transisi 12 K

Simulasi pada $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, masukan v_4 bernilai 0 karena pada $\text{NdBa}_2\text{O}_{7-x}$ hanya mempunyai satu bidang CuO sehingga tidak ada interaksi oksigen antar bidang tersebut. Hasil simulasi untuk $\text{NdBa}_2\text{O}_{7-x}$ menunjukkan ada empat temperatur transisi. Untuk kandungan oksigen 90 %, lonjakan kalor jenis terjadi pada suhu 30 K sehingga temperatur transisinya adalah 30 K. untuk kandungan oksigen 80 %, 70 % dan 60 % temperatur transisinya masing-masing

adalah 28 K, 27 K dan 26 K. Pada keadaan ini interaksi fonon-elektron (fonon yang mengikat elektron) semakin berkurang sehingga menurunkan temperatur transisi. Untuk kandungan oksigen 50%, 40%, 30%, 20% dan 10% tidak didapatkan temperatur transisinya sehingga tidak bersifat superkonduktor. Grafik dengan kandungan oksigen 50%, 40%, 30%, 20% dan 10% terdapat pada lampiran1.

Simulasi dengan dua bidang CuO, bertujuan untuk mendapatkan temperatur transisi yang lebih tinggi. Nilai masukannya adalah sebagai berikut:

$$N_x = 70, N_y = 70, N_z = 20$$

$$V_1 = 0.150 \text{ eV}$$

$$V_2 = 0.114 \text{ eV}$$

$$V_3 = 0.032 \text{ eV}$$

$$V_4 = 0.020 \text{ eV}$$

$$\text{grup} = 30$$

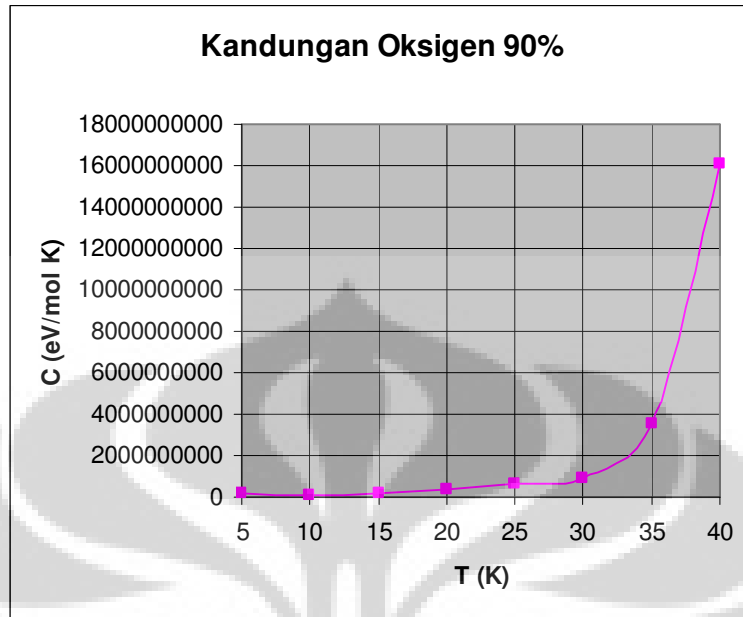
$$\text{sweep} = 30$$

$$k_b = 8.125e-05$$

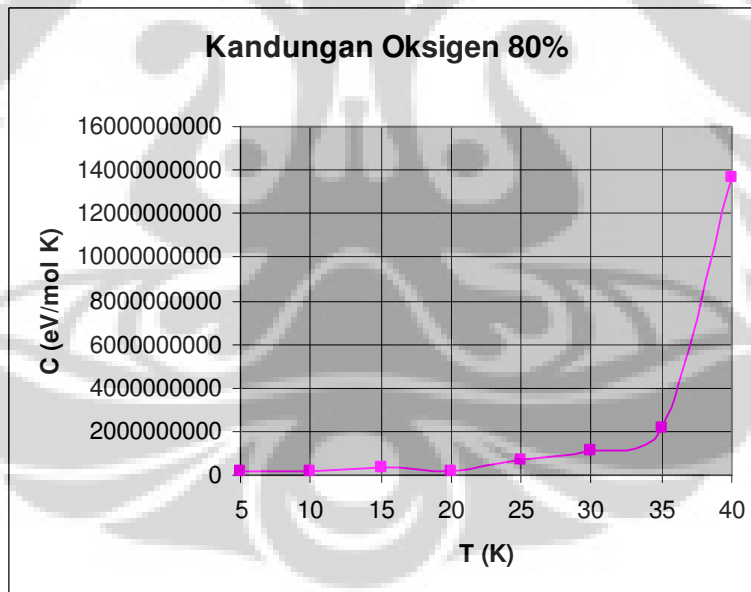
$$x = 0,1$$

$$\Delta T = 5 \text{ K}$$

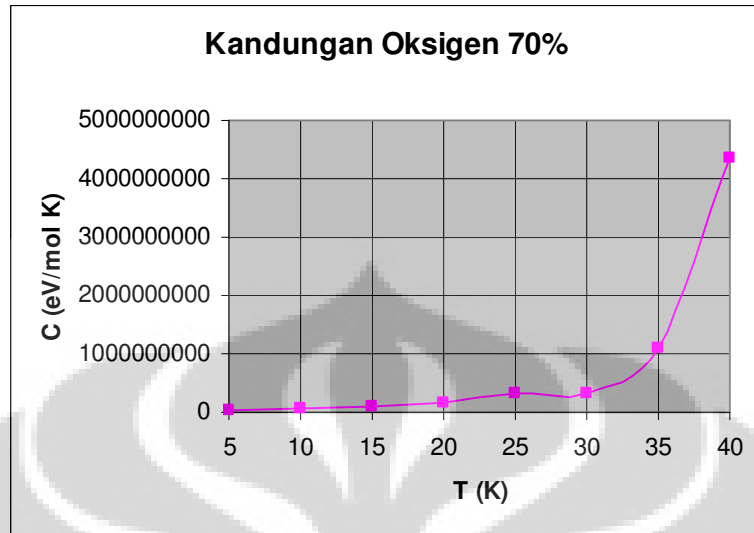
Nilai masukkan ini sama seperti pada senyawa dengan satu bidang CuO, hanya berbeda pada nilai V_4 . Nilai masukkan V_4 untuk senyawa dengan dua bidang CuO adalah $V_4 = 0.020 \text{ eV}$. Nilai V_4 ini akan mempengaruhi interaksi antara atom oksigen antar bidang CuO. Hasil simulasi ini ditunjukkan pada Gambar 4.7 dengan kandungan oksigen 90%. Gambar berikutnya menunjukkan grafik hasil simulasi untuk kandungan oksigen yang lain.



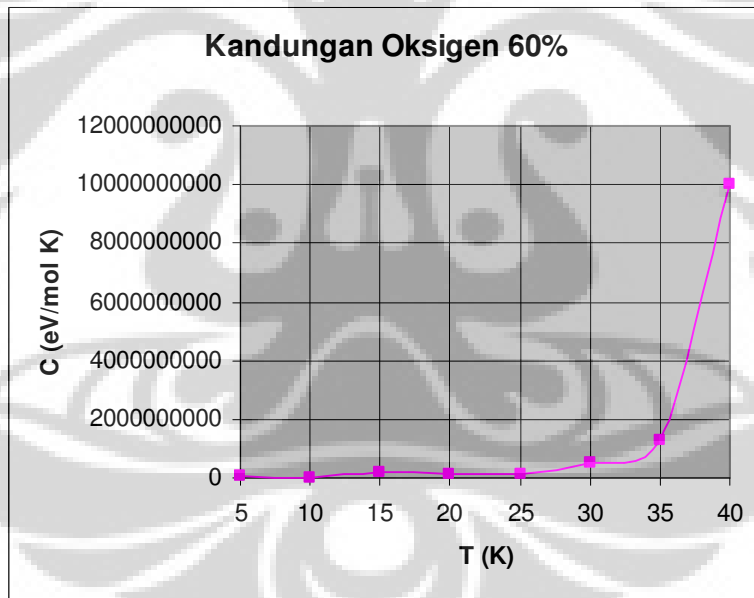
Gambar 4.7. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO



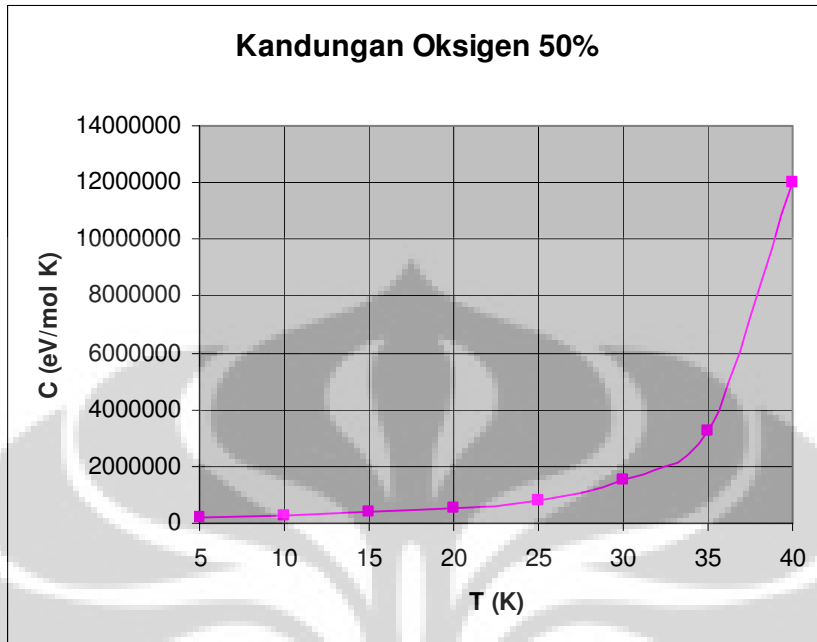
Gambar 4.8. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO



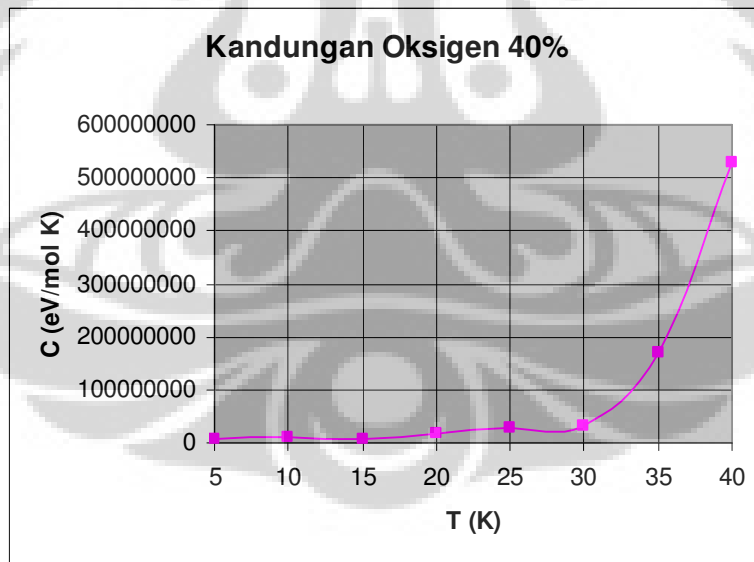
Gambar 4.9. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO



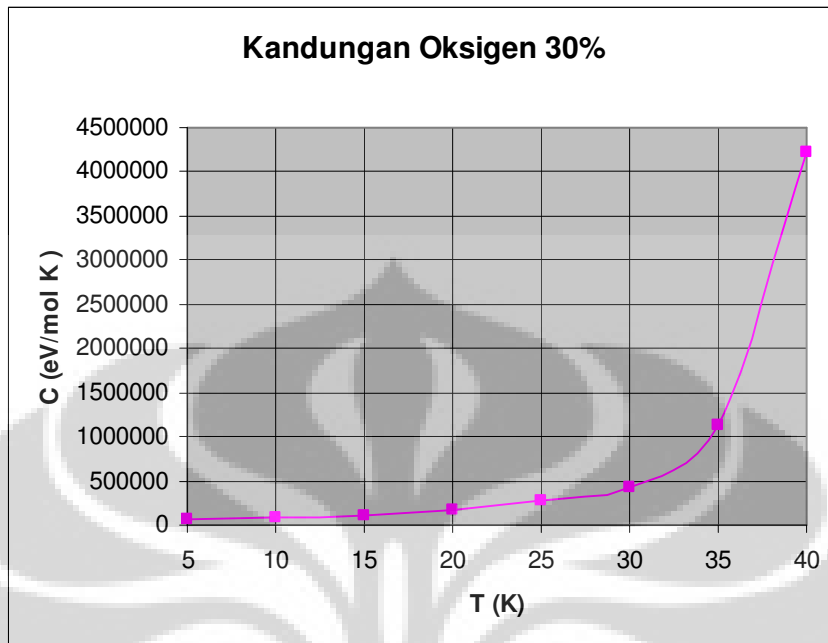
Gambar 4.10. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO



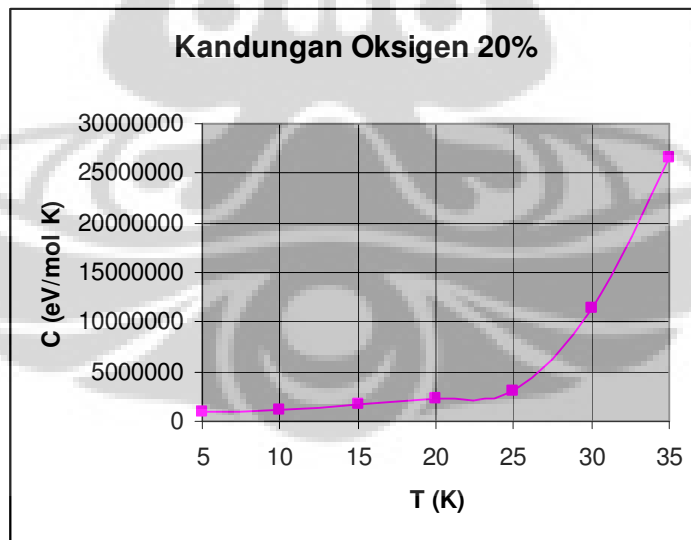
Gambar 4.11. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO



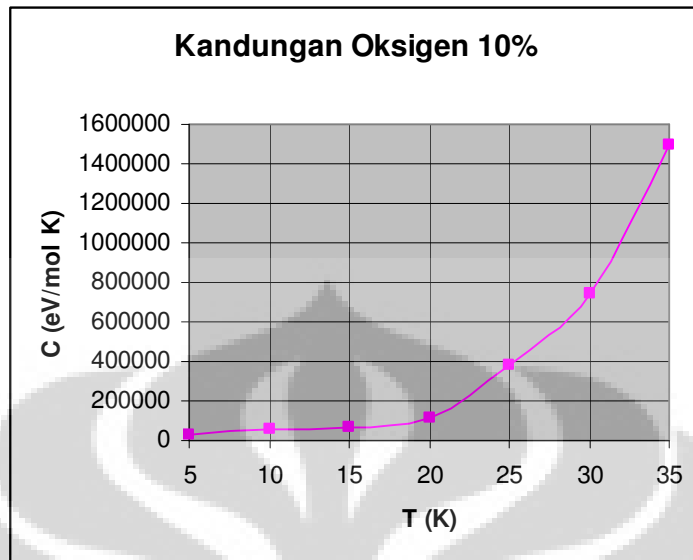
Gambar 4.12. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO



Gambar 4.13. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO



Gambar 4.14. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO

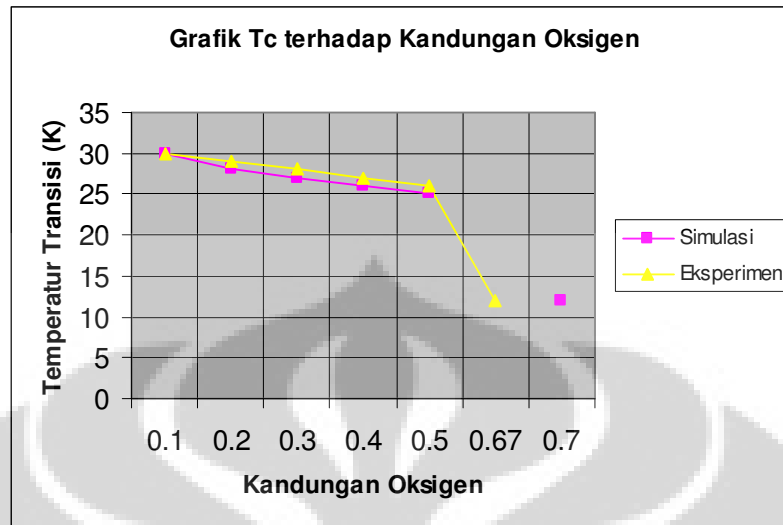


Gambar 4.15. Grafik kalor jenis terhadap temperatur Untuk dua bidang CuO

Hasil simulasi untuk dua bidang CuO dengan kandungan oksigen dari 90% sampai 10% tidak terdapat lonjakan kalor jenis. Keadaan ini menunjukkan bahwa tidak terdapat temperatur transisi untuk senyawa ini. Sehingga dapat dikatakan bahwa senyawa ini tidak bersifat superkonduktor. Pada keadaan interaksi fonon-elektron yang semakin kecil, maka yang akan lebih dominan adalah interaksi antara elektron dengan elektron sehingga tidak terjadi pasangan elektron. Karena tidak terjadi pasangan elektron maka bahannya sudah tidak bersifat superkonduktor. Untuk tiga bidang CuO tidak terdapat temperatur transisi walaupun kandungan oksigen diubah dari 90% sampai 10%. Grafik kalor jenis terhadap temperatur untuk tiga bidang CuO, terdapat pada lampiran 1.

4.2 Pengaruh Kandungan Oksigen Terhadap Temperatur Transisi

Kandungan oksigen yang berbeda-beda akan mempengaruhi pada besarnya temperatur transisi. Grafik antara kandungan oksigen dan temperatur transisi dapat digambarkan dari grafik kalor jenis terhadap temperatur. Gambar 4.16 merupakan grafik antara temperatur transisi dengan kandungan oksigen [28]. Dari kedua grafik ini dapat dilihat bahwa hasil simulasi mendekati hasil eksperimen.



Gambar 4.16. Grafik temperatur transisi terhadap kandungan oksigen

Hasil simulasi menunjukkan bahwa senyawa $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ temperatur transisinya menurun dengan berkurangnya kandungan oksigen. Hasil eksperimen juga menunjukkan bahwa dengan berkurangnya kandungan oksigen akan menurunkan temperatur transisi.

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

Dari pembahasan pada BAB V dapat disimpulkan bahwa:

1. Hasil simulasi menunjukkan bahwa temperatur transisi dipengaruhi oleh kandungan oksigen. Temperatur transisi naik dengan bertambahnya kandungan oksigen.
2. Senyawa bersifat superkonduktor untuk kandungan oksigen antara 30 % sampai 90 % atau berada dalam skala $0,1 < x < 0,7$.
3. Senyawa dengan dua dan tiga bidang CuO tidak bersifat superkonduktor untuk kandungan oksigen 10% sampai 90%.
4. Hasil simulasi mendekati hasil eksperimen

Dalam penelitian ini saya menyarankan:

1. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut dengan memasukkan besaran-besaran lain seperti potensial kimia.
2. Perlu dilakukan simulasi dengan kemampuan komputer yang lebih baik, sehingga ukuran kisi yang digunakan lebih besar.
3. Perlu dilakukan penelitian dengan menggunakan metode komputasi paralel untuk mempercepat komputasi.

DAFTAR REFERENSI

- [1] Goodlin E, Oka A, G. Wen J, Shiohara Y, Kambara M, Umeda T. 1998. Twins and Related Morphology of as-Grown Neodymium-Rich $\text{Nd}_{1+y}\text{Ba}_{2-y}\text{Cu}_3\text{O}_z$ Crystals. *Physica C* 299 (1998) 279-300.
- [2] Dyakonov V, Fita L, Doroshenko N, Baran M, Piechota S, Szymczak. 1997. Insulator-superconductor transition in $\text{NdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ ceramics under pressure. Published by Elsevier Science B.V.
- [3] P. P. Freitas and T. S. Plaskett. 1987. High-temperature order-disorder phase transition in the superconductor $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ observed by electrical resistivity measurements. *Phys. Rev. B* Vol. 36, No. 10.
- [4] J. D. Jorgen, B. W. Veal, W. K. Kwok, G. W. Crabtree, A. Umezawa, L. J. Nowicki, and A. P. Paulikas. 1987. *Phys. Rev. B* Vol. 36, No. 10.
- [5] Z. Z. Wang, J. Clayhold, and N. P. Ong. 1987. Variation of Superconductivity with Carrier Concentration in Oxygen-doped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$. *Phys. Rev. B* Vol. 36, No. 13.
- [6] T. J. Kistenmacher, W. A. Bryden, J. S. Morgan, and K. Moorjani. 1987. Stabilization of the tetragonal phase and superconducting behavior in $\text{RBa}_2(\text{Cu}_{1-x}\text{Fe}_x)_3\text{O}_y$ ($\text{R} = \text{Y, Gd}; 0 \leq x \leq 0.15$). *Phys. Rev. B* Vol. 36, No. 16.
- [7] C. Chailout, M. A. Alario-Franco, J. J. Capponi, J. Chenavas, J. L. Hodeau, and M. Marezio. 1987. Oxygen-vacancy ordering in the $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{7-x}$ ($0 \leq x \leq 1$) superconducting system. *Phys. Rev. B* Vol. 36, No. 13.
- [8] D. de Fontaine and L. T. Wille. 1987. Stability analysis of Special-point ordering in the basal plane in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. *Phys. Rev. B* Vol. 36, No. 10.
- [9] Pamungkas M. A. 2001. Perhitungan Kalor Jenis Superkonduktor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ dengan Model ASYNNNI. Universitas Indonesia: Thesis S2 Fisika Murni dan Terapan.
- [10] Suherman A. 2006. Perhitungan Kalor Jenis Superkonduktor BSCCO dengan Model ASYNNNI. Universitas Indonesia: Thesis S2 Fisika Murni dan Terapan.

- [11] Tretyakov Yuri D and Goodilin Eugene A. 2004. Fundamental Chemical Features of Complex Magnetis of Cuprates for Advanced Functional Materials Engineering. Pure Appl.Chem., Vol. 76, No. 9, pp. 1749-1768.
- [12] D. M. Newns. 1987. Two-particel resonance pairing mechanism of oxide superconductivity. Phys. Rev. B Vol. 36, No. 10.
- [13] F. Marsiglio, R. Akis, and J. P. Carbotte. 1987. Thermodynamics in very strong cupling: A possible model for the high-Tc oxides. Phys. Rev. B Vol. 36, No. 10.
- [14] T. Fiig, N.H. Andersen, P, A. Lingard, J.Berlin, O.G Mouritsen, Phys Rev B 54, 556.
- [15] Thomas Fiig. 1994. Ordering Phenomena and Non-Equilibrium Properties of Lattice Gas Models. Denmark : Riso National Laboratory, Roskilde.
- [16] K. Binder, D. W. Heermann. 1992. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [17] Betts, Davids, Roy E.Turner. Introductory Statistical Mechanics. New York: Addison Wesley.
- [18] Gould H, Tobochnik J. 1996. An Introduction to Computer Simulation Methods. Application to Physical Systems. Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
- [19] Marouchkine A. 2004. Room-Temperature Superconductivity. England: Cambridge International Science Publishing.
- [20] M. E. Reeves, D. S. Citrin, B. G. Pazol, T. A. Friedmann, and D. M. Ginsberg. 1987. Specific heat of $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ in the normal and superconducting states. Phys. Rev. B Vol. 36, No. 13.
- [21] G. Nieva, E. N. Martinez, F. De la Cruz, D. A. Esparza, and C. A. D'Ovidio. 1987. Specific heat of $La_{1.8}Sr_{0.2}CuO_4$: Anomaly at the superconducting transition. Phys. Rev. B Vol. 36, No. 16.
- [22] Cardwell D. A, Ginley D. S. 2003. Handbook of Superconducting Materials. Volume I: Superconductivity, Materials and Processes. Philadelphia: IOP Publishing Ltd.
- [23] P. M. Horn, D. T. Keane, G. A. Held, J. L. Jordan-Sweet, D. L. Kaiser, and F. Holtzberg. 1987. Orthorombic Distortion at the Superconducting

Transition in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$: Evidence for Anisotropic Pairing. Phys. Rev. Lett. Vol. 59, No. 24.

- [24] A. G. Khachaturyan and J. W. Morris, Jr. 1987. Ordering and Decomposition in the High-Temperature Superconducting Compound $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$. Phys. Rev. Lett. Vol. 59, No. 24.
- [25] J. P. Andreetta, H. C. Basso, E. E. Castellano, J. N. H. Gallo, and A. A. Martin. 1987. Crystallographic phase and transport properties in the superconducting Tm-Ba-Cu-O compound system. Phys. Rev. B. Vol. 36, No. 10.
- [26] L. R. Testardi, W. G. Moulton, H. Mathias, H. K. Ng, and C. M. Rey. 1987. Superconducting and nonsuperconducting phase of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$: Modifications at the high-temperature phase transition. Phys. Rev. B. Vol. 36, No. 16.
- [27] Maria Ronay. 1987. Hole formation in orthorombic and tetragonal $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Phys. Rev. B. Vol. 36, No. 16.
- [28] Shu-Xia Wang, Wen-Li Liu, Sheng-Hao Han, Han Zhang. 2003. Combinative energy, oxygen deficiency and superconductivity in $\text{LnBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ ($\text{Ln} = \text{Nd, Er, Sm}$). Chin. Phys. Soc. and IOP Publishing Ltd.