

BAB I

PENDAHULUAN: LATAR BELAKANG

1.1 Gambaran Umum

Fenomena perubahan fase magnetik merupakan salah satu topik penelitian intensif hingga saat ini karena relevansinya dalam memahami sifat dasar material dan aplikasinya dalam teknologi modern. Sifat magnetik seperti feromagnetisme, berperan penting dalam pengembangan berbagai perangkat (*devices*) teknologi, utamanya pada sistem penyimpanan data, memori dan sensor magnetik, serta teknologi spintronik. Karena itu, studi sifat magnetik pada sistem kisi *multilayers* (banyak-lapisan) menjadi sangat relevan diteliti, sebab sistem *multilayers* magnetik sebagai material kompleks, banyak digunakan dalam pengembangan nano-teknologi. Dalam sistem memori magnetik seperti MRAM (*Magnetoresistive Random Access Memory*) dan teknologi penyimpanan data berbasis GMR (*Giant Magnetoresistance*), sifat magnetik material *multilayers* digunakan untuk membaca dan menulis data dengan tingkat efisiensi tinggi (Baibich *et al.*, 1988; Hirohata *et al.*, 2020). Selain itu, dalam aplikasi spintronik, pemanfaatan material *multilayers* yang sangat tipis memungkinkan manipulasi spin elektron untuk pengolahan informasi yang lebih cepat dan hemat energi. Namun, pengembangan material yang lebih efisien memerlukan pemahaman mendalam tentang sifat magnetik material *multilayers*, termasuk pengaruh interaksi antar lapisan, anisotropi magnetik, dan geometri kisi (Chappert *et al.*, 2007).

Sistem kisi *multilayers* tersusun oleh tumpukan lapisan (*layer*) dua-dimensi (2D), yang merepresentasikan sistem kisi *quasi*-tiga dimensi (*quasi*-3D). Sistem ini menawarkan kompleksitas tambahan dalam mengeksplorasi sifat magnetik dan sifat termodinamik material, termasuk sifat kritisnya — perilaku sistem di titik transisinya (titik kritis). Selain geometri kisi, sifat dan perubahan fase sistem ini juga sangat dipengaruhi oleh jenis interaksi pasangan (interaksi kisi); melibatkan interaksi antar lapisan (*inter-layer*) dan interaksi dalam lapisan (*intra-layer*) yang kompleks. Di sisi lain, interaksi *inter-layer* dalam sistem *multilayers* dengan sifat anisotropi magnetik



menyebabkan perilaku transisi fase yang unik, termasuk magnetik eksotik, seperti Skyrmions magnetik (*Skyrmionics*) pada sky *et al.*, 2022; Cheng *et al.*, 2023). Interaksi *inter-layer* dan heterogen (tak-homogen) dapat memainkan peran besar terhadap sifat magnetik tersebut. Namun, dalam penelitian ini, interaksi *inter-layer* yang bersifat isotropik (homogen); yaitu interaksi feromagnetik (FM),

sehingga sistem *multilayers* ini dipandang mirip dengan material *thin films* (film tipis) magnetik, dimana ketebalannya sebanding dengan jumlah *layer*. Selain itu, struktur kisi yang ditinjau pada tiap *layer* berupa kisi *regular* 2D sederhana; yakni kisi persegi (*square*). Walaupun sistem *multilayers* dalam studi ini sangat sederhana, namun kompleksitas dari efek dimensionalitas sistem *multilayers* (*quasi*-3D) karena keterbatasan konektivitas akibat jumlah *layer* terbatas (bukan 3D penuh) tetap dapat berperan besar pada perubahan fase dan sifat kritis (magnetik) sistem (Wang *et al.*, 2024). Oleh karena itu, studi ini difokuskan pada pengaruh dimensionalitas terhadap perubahan fase dan stabilitas feromagnetisme sistem *multilayers*. Termasuk juga penelusuran sifat persilangan (*crossover behavior*), yang muncul karena efek dimensionalitas ketika sistem berubah dari 2D murni ke kasus 3D.

Dalam sistem magnetik, sifat anisotropi magnetik (anisotropik) juga memiliki peran yang sangat penting terhadap perubahan fase, utamanya kemunculan *true long-range order* (keteraturan sempurna), seperti feromagnetisme (kemunculan fase FM). Keberadaan TLRO (*true long-range order*) dalam sistem 2D sangat bergantung pada sifat anisotropi, sebab spin dengan simetri kontinu (isotropi) seperti model XY hanya mengalami transisi BKT (Berezinskii-Kosterlitz-Thouless) dari keadaan tak-teratur ke QLRO (*quasi-long-range order*) pada temperatur rendah (Mermin dan Wagner, 1966; Hohenberg, 1967). Pengaruh dari anisotropi magnetik ini dicontohkan dengan jelas pada model *clock* (jam) q -keadaan (versi diskret model XY) dalam sistem 2D, dimana kediskretannya dapat merubah keadaan QLRO ke TLRO pada temperatur rendah untuk $q > 4$ (Surungan *et al.*, 2019; Surungan, 2019). Hal serupa juga ditunjukkan pada model spin *edge-cubic* 2D yang merupakan salah satu versi diskret model Heisenberg (simetri kontinu $O(3)$), dimana fase FM muncul sebagai keadaan dasar sistem pada temperatur transisi terendah (Surungan *et al.*, 2008).

Sama seperti model *edge-cubic*, model spin *dodecahedral* juga merupakan salah satu model *polyhedral*; versi diskret model Heisenberg klasik, namun simetri dan jumlah keadaannya lebih tinggi ($q = 20$). Model ini menawarkan perspektif baru dalam memahami sistem (material) magnetik dengan anisotropi tinggi, khususnya pada sistem *multilayers*. Untuk kasus feromagnetisme, sifat anisotropik berperan penting dalam menentukan stabilitas fase FM. Anisotropi magnetik yang kuat dapat meningkatkan temperatur kritis dan stabilitas fase FM. Hal ini ditunjukkan oleh hubungan temperatur kritis T_c terhadap jumlah keadaan spin, dimana T_c sistem 2D secara sistematis meningkat ketika jumlah keadaan semakin kecil (Surungan dan Okabe, 2012; Ueda *et al.*, 2020).

Study perubahan fase FM dengan model spin *dodecahedral* memungkinkan



tropi magnetik secara lebih mendalam, terutama pada daerah g korelasi sistem menjadi semakin signifikan. Dalam penelitian *dodecahedral* digunakan untuk merepresentasikan sifat anisotropik eks dalam sistem *multilayers*. Sejauh ini, penelitian yang spin *dodecahedral* dalam sistem *multilayers* (*quasi*-3D) masih kan belum ada), sehingga penelitian ini menjadi pendekatan ubahan fase magnetik. Perlu diketahui bahwa material *multi*-

layers dengan sifat anisotropi magnetik dapat menunjukkan sifat eksotik seperti *Skyrmionics* atau *chiral* magnetik (Lonsky *et al.*, 2022; Cheng *et al.*, 2023), yang memainkan peran besar dalam pengembangan teknologi magnetik berbasis topologi. Dengan kata lain, anisotropi magnetik dapat menjadi faktor utama yang mempengaruhi sifat magnetik sistem. Karena itu, penerapan model spin *dodecahedral* sebagai representasi anisotropi magnetik dalam sistem *multilayers*, secara sistematis mungkin dapat menghadirkan sifat atau fase eksotik dalam sistem.

Untuk mengidentifikasi sifat-sifat fisis (sifat kritis atau termodinamis) yang muncul dalam sistem *multilayers*, parameter atau kuantitas (besaran) fisis sistem perlu di-karakterisasi (dihitung). Dalam studi perubahan fase, kuantitas fisis (seperti panas jenis, suseptibilitas, magnetisasi, dan lainnya) dapat dihitung menggunakan metode simulasi Monte Carlo (MC). Tujuan utama penelitian ini adalah untuk membuktikan keberadaan sifat *crossover behavior* sebagai akibat dari efek dimensionalitas dalam sistem *multilayers* dengan model spin *dodecahedral*. Sifat ini dapat diidentifikasi berdasarkan eksponen kritis sistem, sedangkan efek dimensionalitas digambarkan melalui diagram fase (temperatur-ketebalan) dari sistem *multilayers* (Wang *et al.*, 2024; Yang *et al.*, 2021). Menariknya, pada beberapa studi sebelumnya, penelusuran sifat termodinamik dan magnetik sistem *multilayers* telah dilakukan menggunakan simulasi MC standar (Feng *et al.*, 2011; Dani *et al.*, 2015; Belhamra *et al.*, 2020; Chandra, 2023). Misalnya sistem *multilayers* FCC (*face-centered cubic*) Heisenberg (isotropik) dengan permukaan *amorphous* menunjukkan sifat magnetik bergantung pada efek *amorphous* (Feng *et al.*, 2011). Bahkan diagram fase antara temperatur kritis dengan ketebalan (jumlah *layer*) menunjukkan bahwa efek *amorphous* memiliki peran yang sangat besar terhadap sifat kritis (magnetik) sistem. Hal serupa juga ditunjukkan pada sistem *multilayers* feromagnetik–*non*-magnetik–anti-feromagnetik (FM/NM/AFM) dengan model spin-3/2 Blume–Capel, dimana diagram fase sistem ini menunjukkan bahwa temperatur kritis tidak hanya bergantung pada ketebalan sistem magnetik, tapi juga terhadap ketebalan NM sebagai perantara dan efek interaksi RKKY (Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida) (Dani *et al.*, 2015). Begitu pun pada sistem tiga-lapisan (3-*layers*) feromagnetik yang melibatkan interaksi *intra-layer* dan *inter-layer* berbeda; dengan model spin *mixed*-(1,3/2,2) Ising (Belhamra *et al.*, 2020) dan efek dilusi titik (*site dilution*) pada struktur kisi *layer* segitiga dengan spin-1/2 Ising (Chandra, 2023), dimana temperatur kritis hanya bergantung pada efek interaksi *intra*- dan *inter-layer*. Keempat sistem *multilayers* pada studi tersebut tidak menunjukkan dengan jelas efek dimensionalitas pada diagram fasenya, bahkan tidak memperlihatkan adanya sifat *crossover behavior* dalam sistem *multilayers* (*quasi*-



2D) tersebut. Selain itu, penggunaan metode simulasi MC standar (yaitu algoritma kurang efektif, sebab kompleksitas dari sistem yang diamati sistem terperangkap pada energi lokal-*minima*. Karena itu, performa algoritma Metropolis pada sistem kompleks (*complex*), *range* dapat diterapkan dalam simulasi MC ini.

Exchange merupakan salah satu metode paling efektif dalam nya untuk sistem *complex* seperti spin *glass* (Surungan *et al.*,

2015; Surungan, 2016), karena kemampuannya dalam mengatasi perangkap energi lokal-*minima*, terutama pada sistem dengan banyak konfigurasi metastabil akibat frustrasi geometris (Surungan *et al.*, 2018; Kakizawa *et al.*, 2024) atau bahkan karena anisotropi tinggi. Dengan mengizinkan pertukaran konfigurasi antara replika pada temperatur yang berdekatan, algoritma *Replica-Exchange* memastikan bahwa sistem dapat menjelajahi ruang konfigurasi secara menyeluruh dan lebih efisien, sehingga mempercepat konvergensi menuju keadaan stabil (Kawashima dan Young, 1996). Dengan algoritma ini, parameter kritis seperti temperatur dan eksponen kritis dapat ditentukan dengan lebih akurat. Algoritma *Replica-Exchange* telah diterapkan untuk sistem 3D dengan struktur kisi *layer* frustrasi (segitiga), dimana metode ini dikombinasikan dengan algoritma Wang-Landau yang berbasis rapat keadaan (*density of state*) energi (Murtazaev *et al.*, 2020). Sifat magnetik termasuk diagram fase magnetik dalam studi tersebut hanya berfokus pada pengaruh medan eksternal. Dalam penelitian ini, studi simulasi MC difokuskan pada penerapan algoritma Metropolis standar dengan kombinasi algoritma *Replica-Exchange*, dimana sistem hanya bergantung pada fluktuasi termal, tanpa ada pengaruh medan eksternal. Semua parameter fisis (sifat kritis dan termodinamis), termasuk efek dimensionalitas, bahkan sifat *crossover behavior* dalam sistem *multilayers* (*quasi*-3D) dikarakterisasi dan diidentifikasi dengan menggunakan metode ini.

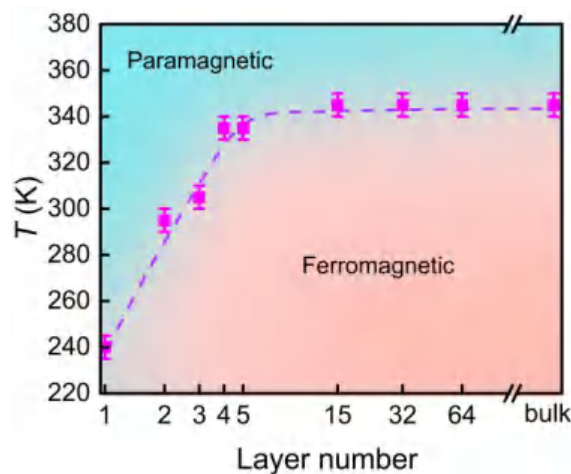
Dengan demikian, berdasarkan pendekatan baru yang ditawarkan, penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi terhadap pemahaman fundamental transisi fase dalam sistem magnetik, khususnya untuk sistem *multilayers* dengan anisotropi magnetik dari model spin *dodecahedral* dan ketebalan (jumlah *layer*) yang beragam. Pemahaman mendalam tentang sifat magnetik dalam sistem *multilayers* model spin *dodecahedral* dapat digunakan untuk merancang *devices* teknologi dengan efisiensi tinggi. Selain itu, pendekatan teoritis yang digunakan dalam penelitian ini dapat menjadi dasar (*benchmark*) untuk studi lanjut dan pengembangannya pada sistem yang lebih kompleks atau metode yang lebih baik.

1.2 Sistem Magnetik: *Thin Film* dan *Multilayers*

Material *thin film* (film/lapisan tipis) atau *multilayers* umumnya sering dijumpai pada material semikonduktor, seperti TiO_2 , ZnO *thin films* atau ZnO/TiO_2 *bilayers* (2-*layers*), dengan sifat listrik dan optik (Gareso *et al.*, 2018; 2022) yang banyak dimanfaatkan dalam *devices* elektronik berbasis elektron. Sedangkan dalam sistem magnetik, material *thin films* atau *multilayers*; seperti Fe_3GaTe_2 *nanoflake*, FeRh (FM/AFM) *bilayer*, $\text{Pt}/\text{Co}/\text{Mn}$ - dan $(\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3/\text{MgO})_N$ *multilayers*, lebih banyak di-*devices* memori dan penyimpanan berbasis momen magnet diaplikasikan pada teknologi spintronik yang berbasis spin dan *layers* umumnya bersifat *heterostructure*, sebab dibangun oleh lebih material *thin film* dengan sifat listrik atau kimia (struktur) kombinasi ini dapat menghasilkan fenomena atau sifat eksotik di



antaranya (karena interaksi antar *layer* yang berbeda atau unik). Sedangkan pada material *thin films*, struktur dan interaksinya bersifat homogen (sama pada *intra-layer* maupun *inter-layer*). Berdasarkan kondisi ini, aspek dasar yang membedakan antara sistem *multilayers* dan *thin films* dalam sistem magnetik terletak pada interaksi *inter-layer* dan *intra-layer* sistem. Jika interaksi dalam sistem *multilayers* homogen (baik *inter-* maupun *intra-layer* tak-terbedakan), maka sistem lebih sesuai dengan *thin films* magnetik, sedangkan jika interaksinya tak-homogen (*inter-* dan atau *intra-layer* berbeda) maka sistem dikenal sebagai *multilayers* magnetik yang lebih kompleks. Oleh karena itu, sistem magnetik dengan kisi *multilayers* (*quasi-3D*) dapat dikategorikan menjadi dua tipe, yaitu: *thin films* magnetik untuk interaksi homogen, dan *multilayers* magnetik untuk interaksi tak-homogen.



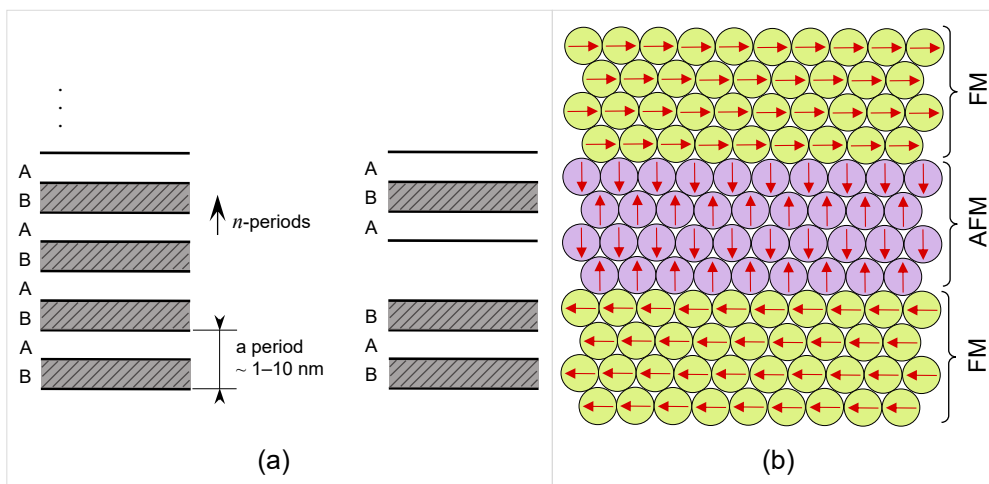
Gambar 1.1. Diagram fase magnetik Fe_3GaTe_2 *thin flakes* yang menampilkan pengaruh dimensionalitas terhadap sifat kemagnetan (kritis) material. Titik-titik persegi menunjukkan temperatur Curie (T_c) yang bergantung pada ketebalan (jumlah *layer*) material, sedangkan garis putus-putus merepresentasikan daerah kritis sebagai batas (titik transisi) antara fase PM dan FM (Wang *et al.*, 2024).

Pengaruh dimensionalitas (efek dari interaksi *inter-layer* dengan konektivitas yang terbatas) akibat jumlah *layer* yang terbatas terhadap sifat fisis material merupakan aspek penting dan menarik untuk dikaji dalam sistem *multilayers* (khususnya *thin films*).



Sifat termodinamis pada logam Au- dan Al-*thin films* secara umum untuk ketebalan 10–200-*layers* (Hung *et al.*, 2015), namun efek ini tidak ditemukan pada ketebalan tersebut. Pada pengamatan sifat magnetik (M ; van der Waals (vdW) Fe_3GaTe_2 *nanoflake* (*thin films*)), data magnetik yang diperoleh seperti pada Gambar 1.1, menunjukkan pengaruh ketebalan material terhadap temperatur kritis (temperatur Curie, T_c) terhadap jumlah *layer* material (Wang *et al.*, 2024). Berdasarkan pada diagram

fase tersebut (Gambar 1.1), terlihat bahwa T_c meningkat seiring dengan peningkatan jumlah *layer* dari 1- hingga 5-*layers*, sedangkan T_c hampir konstan pada ketebalan > 5 -*layers* bahkan hingga ukuran *bulk* (3D penuh). Peningkatan T_c ini menunjukkan adanya efek dimensionalitas terhadap sifat kritis material yang teramati pada ukuran sangat tipis (1–5-*layers*). Hal serupa juga ditunjukkan pada diagram fase magnetik material AFM (tipe-A); MnBi_2Te_4 *flakes*, dimana temperatur Néel (temperatur kritis sistem AFM), T_N mengalami peningkatan signifikan seiring dengan meningkatnya ketebalan *flakes* dari 1- hingga 5-*layers*, sementara itu T_N hampir tidak berubah pada ketebalan di atas 5-*layers* hingga 25-*layers* (Yang *et al.*, 2021). Oleh karena itu, untuk mengamati efek dimensionalitas pada sistem *multilayers* (*quasi*-3D), ukuran sistem harus sangat tipis dengan jumlah *layers* berkisar antara 1–5- atau hingga 6-*layers*. Efek dimensionalitas bisa jadi memainkan peran besar terhadap perilaku *crossover behavior* yang muncul sebagai sifat transisi dari sistem 2D (1-*layer*) ke kasus 3D (jumlah *layers* > 1).



Gambar 1.2. Ilustrasi *multilayers* magnetik sederhana yang terbuat dari dua material *thin films* berbeda. (a) Skema sistem *multilayer* (A/B)_n dan 3-*layers*; A/B/A dan B/A/B, dimana B merepresentasikan material FM, sedangkan A adalah material *non*-FM (Renard, 1993). (b) Contoh sistem magnetik 3-*layers* FM/AFM/FM.

Selain efek dimensionalitas, pengaruh interaksi *inter-layer* ataupun *intra-layer* yang berbeda (tak-homogen) dapat menambah kompleksitas sistem dan menjadi parameter penting dalam sistem *multilayers* terutama pada material *multilayers*



, *multilayers* magnetik merupakan material yang terbuat dari sangat tipis (*ultrathin films*) dengan sifat magnetik berbeda; antara feromagnetik (FM) dan bukan feromagnetik (*non*-FM), disajikan pada Gambar 1.2 (Renard, 1993). Kompleksitas dari *inter-layer* pada *multilayers* magnetik dapat menghasilkan sifat yang berbeda dengan material *thin films* atau *bulk*. Pada studi FMR

(*ferromagnetic resonance*), interaksi antar *layer* dapat menimbulkan resonansi Fano — resonansi yang mengubah bentuk puncak (*peak*) FMR menjadi asimetri (tidak simetris) — yang digunakan untuk mendefinisikan jenis interaksi pasangan *inter-layer* (Udalov *et al.*, 2019). Bahkan interaksi *inter-layer* ini dapat menimbulkan puncak resonansi ganda dengan rasio asimetri tinggi pada material Si/Ni *multilayers* akibat sifat anisotropi magnetik (Singh dan Kumar, 2022). Hal ini terjadi karena interaksi dua permukaan material (*interfaces*) dengan sifat berbeda dalam *multilayers* magnetik dapat memicu munculnya interaksi yang unik di antaranya dan menghasilkan sifat yang eksotik. Misalnya kombinasi material FM/NM *multilayers* dapat menimbulkan interaksi pasangan *inter-layer* berupa AFM (Story, 2003), bahkan sifat *magnetoresistance* (MR) dapat diamati pada kombinasi ini dengan anisotropi magnetik tinggi (Rizal *et al.*, 2016). Material *multilayers* yang sangat tipis juga dapat memiliki struktur elektronik dan sifat magnetik (berupa ferimagnetik) sebaik kondisi *bulk* seperti pada material $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3/\text{MgO}$ *multilayers* (Alraddadi, 2021). Material *magnetoelectric* (ME) *multilayers* dengan sifat anisotropi magnetik dapat menghasilkan fase *Domain* magnetik dalam sistem *multiferroic* seperti pada FeCo/Ag *multilayer film* (Staruch *et al.*, 2016). Selain itu, pada pengamatan sifat magnetik material $[\text{Pt}/\text{Co}/X]_n$ (X = logam) *multilayers* dengan anisotropi magnetik mengindikasikan munculnya fase *Bubble-like Domains* yang berpotensi sebagai Skyrmions magnetik (*Skyrmionics*) — fase topologis yang diindikasikan sebagai generasi baru spintronik. Misalnya untuk $X = \text{Mn}$, Mn- *thin films* dapat berkontribusi sebagai interaksi DMI (*Dzyaloshinsky-Moriya interactions*); yang berperan menghasilkan fase *Skyrmionics* (Lonsky *et al.*, 2022), sedangkan untuk $X = \text{Cu}$, Skyrmions magnetik tipe Néel dapat diamati pada suhu ruang (Cheng *et al.*, 2023). Di sisi lain, untuk $X = \text{Al}$ dengan ketebalan Co yang beragam, dapat menghasilkan Skyrmions vertikal tipe 3D yang dinamai fase *Skyrmionic cocoons*, bahkan munculnya fase *co-existence* antara *cocoons* dan *tubular* Skyrmions dapat teramati dalam sistem *multilayers* ini (Grelier *et al.*, 2022). Berdasarkan studi tersebut, efek dimensionalitas, jenis interaksi pasangan *inter-layer*, dan juga anisotropi magnetik sangat berperan penting pada perubahan fase magnetik sistem *multilayers*, bahkan memungkinkan munculnya sifat-sifat baru (eksotik) dalam sistem tersebut.

1.3 Fenomena Kritis

Fenomena kritis merupakan fenomena yang terjadi di daerah titik kritis (transisi) sistem. Fenomena ini penting untuk memahami perubahan fase, seperti pada



m FM; dari keadaan paramagnetik (PM) ke ferromagnetik (FM). n fase sistem FM yang terjadi di sekitar titik kritis ini dikenal *magnetization* (magnetisasi spontan). Aspek menarik dari studi adalah bahwa perilaku sistem di sekitar titik kritis (sifat kritis) an sifat universal (perilaku yang serupa), meskipun detail a berbeda. Dalam sistem magnetik, perbedaan mikroskopis ini

dapat ditunjukkan melalui konfigurasi sistem yang didasarkan pada model spinnya, sedangkan universalitasnya didasarkan pada eksponen kritis sistem.

Fenomena kritis terjadi ketika sistem mendekati titik kritis, yaitu temperatur kritis (T_c), tekanan kritis (P_c), atau parameter kritis lain di mana perubahan fase terjadi. Pada dasarnya, titik kritis ini menjadi titik pemisah antara dua fase berbeda dari suatu sistem. Dalam sistem magnetik, perubahan fase sistem murni umumnya bergantung pada fluktuasi termal (T) dan atau medan magnet eksternal ($\vec{B}$). Namun dalam penelitian ini, sistem FM yang diamati hanya bergantung pada perubahan temperatur, tanpa ada pengaruh medan eksternal. Karena itu, perubahan fase pada sistem ini dapat diamati apabila terdapat magnetisasi spontan di sekitar temperatur kritisnya (T_c); yang ditandai oleh adanya fluktuasi yang besar (perubahan signifikan) pada magnetisasi ($\vec{M}$) sistem. Hal ini dikarenakan pada titik kritis, sifat sistem menjadi sangat sensitif terhadap perubahan kecil temperatur, sehingga terjadi fluktuasi yang besar. Selain magnetisasi spontan, fluktuasi ini juga menyebabkan peningkatan signifikan (divergensi) pada panas jenis (C_v), suseptibilitas (χ) dan panjang korelasi (ξ) sistem di sekitar titik kritisnya.

Perubahan fase dari PM ke FM merupakan perubahan fase orde kedua (*second order phase transition*), dimana magnetisasi (parameter keteraturan) sistem berubah dari $\vec{M} = 0$ ($T > T_c$) menjadi $\vec{M} \neq 0$ ($T < T_c$) dan perubahan ini terjadi secara kontinu. Perubahan nilai magnetisasi yang signifikan tanpa adanya medan magnet eksternal ini didefinisikan sebagai magnetisasi spontan, yang berarti bahwa keberadaan magnetisasi spontan di sekitar titik kritis ($T \rightarrow T_c$) menunjukkan adanya perubahan fase orde ke-2 pada sistem yang diamati. Dalam pandangan mikroskopis, magnetisasi spontan mencerminkan fenomena keruntuhan simetri (*symmetry breaking*), dimana sistem FM cenderung memilih satu orientasi spin spesifik (tertentu) saat $T < T_c$, dari banyaknya keadaan yang dapat dipilih. Karena itu dalam studi fenomena kritis, terjadinya perubahan fase pada sistem FM disebabkan oleh keruntuhan simetri akibat fluktuasi termal, sedangkan sifat kritisnya dikarakterisasi berdasarkan eksponen kritis sistem.

1.3.1 Keruntuhan Simetri

Fenomena keruntuhan simetri (*symmetry breaking*) terjadi ketika sistem mengalami transisi fase dari keadaan mikroskopik tak-teratur (sangat acak dengan simetri tinggi) pada temperatur tinggi ke keadaan teratur (simetri rendah) pada temperatur rendah. Saat temperatur tinggi ($T > T_c$), fluktuasi termal besar sehingga sistem dengan



an mikroskopiknya (arah orientasi spin beragam); dimana (seperti rotasi isotropik) dipertahankan. Sedangkan pada ($T < T_c$), fluktuasi termal kecil dan interaksi pasangan menguat sistem untuk memilih keadaan tertentu (arah orientasi spin tertentu untuk kasus FM) sebagai minimumnya (simetri rotasi rusak).

Keruntuhan simetri dapat diidentifikasi menggunakan parameter keteraturan (seperti magnetisasi), yang ditandai dengan munculnya magnetisasi spontan di daerah titik kritisnya, khususnya untuk sistem FM. Hal ini terjadi karena sistem tidak lagi mempertahankan simetri penuhnya (simetri asal), sehingga menyebabkan rusaknya simetri rotasi (simetri tinggi runtuh ke simetri yang lebih rendah) dan sistem memilih arah magnetisasi tertentu. Peristiwa ini digambarkan dengan jelas oleh Surungan *et al.* (2008); dimana spin dengan model *edge-cubic* (orientasi spin dapat mengarah ke salah satu dari 12 titik tengah rusuk kubus) pada sistem FM dengan kisi persegi (*square*) mengalami dua kali keruntuhan simetri saat sistem didinginkan hingga temperatur rendah ($T \rightarrow 0$). Berdasarkan fenomena tersebut, sistem juga menunjukkan dua perubahan fase; perubahan fase pertama terjadi dari fase acak dengan simetri O_h runtuh menjadi fase teratur dengan simetri C_{3h} pada temperatur transisi tinggi (T_h). Perubahan fase kedua terjadi pada temperatur transisi rendah (T_l), dimana fase lanjut berubah dari simetri C_{3h} ke keadaan dasar (*groundstate*); fase FM, dengan simetri minimum.

Keruntuhan simetri penuh ke subsimetri (seperti $O_h \rightarrow C_{3h}$), menyebabkan sistem mengalami fase subsimetri, misalnya fase topologis. Fase ini muncul ketika sistem dengan subsimetri berada pada keadaan QLRO (*quasi-long-range order*) sebelum berubah ke keadaan TLRO (*true long-range order*). Perubahan fase ganda juga ditunjukkan pada sistem 2D dengan spin planar model *clock* (jam) 5- dan 6-keadaan (Surungan *et al.*, 2019; Surungan, 2019). Dalam teorema Mermin-Wagner-Hohenberg, sistem murni model ini (model XY) pada kisi 2D tidak memiliki TLRO, tetapi mengalami perubahan fase topologis — fase Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) — dari fase PM temperatur tinggi ke QLRO pada temperatur rendah (Mermin dan Wagner, 1966; Hohenberg, 1967). Bahkan pada model Heisenberg dengan simetri kontinu $O(3)$ tidak ditemukan adanya perubahan fase dalam sistem 2D. Sedangkan pada sistem 3D, QLRO tidak ditemukan, tapi TLRO muncul pada temperatur rendah dikarenakan *degree of freedom* (derajat kebebasan) sistem lebih banyak untuk menahan fluktuasi spin daripada sistem 2D. Walaupun kondisi ini berlaku pada sistem dengan simetri kontinu, namun beda halnya untuk sistem dengan simetri diskret. Surungan *et al.* (2019) menunjukkan bahwa model *clock q*-keadaan sebagai model diskret dari model XY mengalami perubahan fase pada temperatur rendah (T_1); dari TLRO yaitu fase FM ke QLRO berupa fase BKT, dan perubahan dari QLRO ke fase PM pada temperatur tinggi (T_2) untuk $q > 4$. Artinya keadaan QLRO terjadi pada temperatur menengah dan TLRO pada temperatur rendah, begitu pula yang ditunjukkan pada model *edge-cubic* sebagai model diskret



g dalam sistem 2D. Bahkan pada model *truncated tetrahedral* menunjukkan empat fase berbeda (Krcmar *et al.*, 2016). Model huan simetri dari simetri penuh *tetrahedral*, S_4 pada fase IV (PM) la fase III, kemudian runtuh ke subsimetri Z_2 (Ising) pada fase ke keadaan TLRO (fase I; FM) dengan simetri minimum. Dari jukkan bahwa sifat anisotropi spin dari simetri diskret dengan

sejumlah keadaan sangat mempengaruhi perubahan fase sistem. Hal ini terjadi karena simetri diskret tinggi (banyak keadaan) dapat terpecah ke subsimetri yang lebih rendah, menimbulkan keadaan QLRO sebelum TLRO yang sudah pasti terjadi pada temperatur rendah. Karena itu, untuk model spin *dodecahedral* juga memiliki kemungkinan yang besar mengalami dua atau lebih transisi fase, sebab anisotropi dan jumlah keadaan spin yang tinggi, sebagaimana yang ditunjukkan oleh grafik panas jenis (C_v) model ini pada sistem 2D (Surungan dan Okabe, 2012).

Pada kasus *multilayers* (*quasi*-3D), selain sifat anisotropik, efek dimensional dari sistem *quasi* yang melibatkan interaksi antar *layer* memainkan peran penting pada perubahan fase sistem. Sifat anisotropik dari model spin *dodecahedral* dan efek dimensional dari sistem *multilayers* merupakan fokus utama studi perubahan fase FM dalam penelitian ini. Selain mengalami transisi fase akibat fluktuasi termal, sistem juga dapat memiliki sifat transisi (*crossover behavior*) dari kasus 2D ke sistem 3D. Aspek menarik dari kasus ini adalah QLRO yang muncul pada sistem 2D mungkin akan lenyap saat ukuran sistem mendekati 3D seutuhnya. Selain itu, karena sistem adalah *quasi*-3D, QLRO mungkin dapat diamati pada sistem yang tipis (3-*layers* atau 2-*layers*), bergantung pada efek dimensional dari konektivitas antar *layer* (yang sebaiknya rendah) terhadap fluktuasi spin. Kehadiran QLRO ditandai dengan adanya magnetisasi ($\overline{M} \neq 0$) namun bukan magnetisasi spontan, yang berarti bahwa terdapat magnetisasi secara lokal dengan korelasi terbatas, bukan global ($\xi \rightarrow \infty$). Kemungkinan munculnya QLRO pada sistem ini merupakan pengaruh kuat dari sifat anisotropik model spin *dodecahedral*. Bahkan dalam beberapa kasus, sifat anisotropi spin pada magnetik *thin films* atau sistem *multilayers* (tipis) sangat mendukung munculnya fase topologis, seperti fase Skyrmionik (Kapitan *et al.*, 2019; Perzhu *et al.*, 2020), meskipun tanpa interaksi DMI (Dzyaloshinsky-Moriya *interactions*) atau tanpa kehadiran medan eksternal (Rößler *et al.*, 2006; Bera dan Mandal, 2021; Kim *et al.*, 2022). Fase ini muncul karena terbentuknya *vortex-like* yang stabil pada permukaan sebuah *layer* akibat runtuhnya simetri *chiral* (Bogdanov dan Rößler, 2001; Mühlbauer *et al.*, 2009). Di sisi lain, keruntuhan simetri penuh ke subsimetri dengan rotasi diskret pada sistem *multilayers* dapat memicu terbentuknya fase unik; seperti fase *Nematic* (pada *liquid crystal*) (Chubukov, 1991; Shao dan Zerda, 1998; Penc dan Läuchli, 2011; Braz, 2017; Bailly-Reyre dan Diep, 2020; Drouin-Touchette *et al.*, 2022) atau fase *Domain* magnetik (Hubert dan Schäfer, 1998; Devizorova *et al.*, 2019), di bawah pengaruh anisotropi spin. Karena itu, pengaruh anisotropi spin dengan model *dodecahedral* dan interaksi antar *layer* (sebagai efek dimensionalitas) terhadap fluktuasi termal sangat berperan besar dalam menentukan fase yang akan QLRO dari sistem *quasi*-3D.



kritis

ra kritis, selain keruntuhan simetri, sistem juga menunjukkan sekitar titik kritisnya, yang dikenal sebagai sifat kritis (*critical* itas dari sifat kritis tersebut dapat dikarakterisasi berdasarkan Pada dasarnya, eksponen kritis merupakan parameter yang

menggambarkan perubahan (fluktuasi atau divergensi) sifat sistem saat mendekati titik kritis T_c , misalnya divergensi pada panjang korelasinya. Panjang korelasi mengalami peningkatan signifikan (divergensi), bahkan mendekati ukuran sistem itu sendiri saat berada di dekat titik kritis. Karena itu, dalam teori *Renormalization Group* (RG); sistem murni memenuhi hukum penyekalaan (*scaling laws*) sehingga ukuran sistem tidak mempengaruhi sifat kritisnya, sebab sifatnya berlaku universal. Secara matematis, panjang korelasi di sekitar titik kritis berperilaku sebagai berikut

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}, \quad (1.1)$$

dimana ν adalah eksponen kritis untuk panjang korelasi. Peningkatan panjang korelasi menyebabkan sifat (kuantitas) fisis lainnya juga mengalami fluktuasi atau divergensi di dekat titik kritis T_c dan mengikuti hukum kekuatan (*power laws*) yang bergantung pada $|T - T_c|^{-\zeta}$ dengan ζ merepresentasikan eksponen kritis spesifik untuk tiap kuantitas fisis berbeda (Jäderlund, 2020). Divergensi kuantitas fisis; seperti panas jenis (kapasitas panas), magnetisasi, dan suseptibilitas, di sekitar titik kritis masing-masing memenuhi kondisi berikut:

$$C \propto |T - T_c|^{-\alpha}, \quad (1.2)$$

$$M \propto (T_c - T)^\beta, \quad \text{untuk } T < T_c \text{ dan } H = 0 \quad (1.3)$$

$$\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}, \quad (1.4)$$

dimana α , β , dan γ masing-masing adalah eksponen kritis untuk panas jenis, magnetisasi, dan suseptibilitas.

Dalam sistem magnetik, eksponen β mendeskripsikan perilaku sistem saat terjadi magnetisasi spontan tanpa adanya medan eksternal $H = 0$. Sedangkan, ketika sistem di bawah pengaruh medan eksternal $H \neq 0$, tepat di titik kritis $T = T_c$ magnetisasi bergantung pada medan magnet (H) sebagai: $M \propto H^{1/\delta}$, dengan eksponen δ terkait dengan laju perubahan magnetisasi (parameter keteraturan). Berdasarkan pada persamaan *scaling*, setiap eksponen kritis tidaklah independen, semuanya memiliki hubungan (relasi) antara satu dengan yang lainnya. Hubungan tersebut diberikan sebagai berikut (Jäderlund, 2020; Xiong *et al.*, 2012):

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (\text{relasi Rushbrooke}) \quad (1.5)$$

$$\frac{\gamma}{\beta} = \delta - 1, \quad (\text{relasi Widom}) \quad (1.6)$$

$$\frac{2 - \alpha}{\beta} = \delta + 1, \quad (\text{relasi Griffiths}) \quad (1.7)$$

$$\frac{\gamma}{\nu} = 2 - \eta, \quad (\text{relasi Fisher}) \quad (1.8)$$

$$2 - \alpha = \nu \cdot D, \quad (\text{relasi hyper-scaling}) \quad (1.9)$$



dimana eksponen η terkait dengan perilaku fungsi korelasi, sedangkan D adalah dimensi sistem (terkait dimensi kisi). Persamaan (1.9) menunjukkan bahwa efek dimensionalitas sangat mempengaruhi sifat dan eksponen kritis sistem. Terkhusus untuk sistem *quasi*-3D, pada jumlah *layer* (n_L) tertentu; $1 < n_L < L_s$, dengan L_s adalah ukuran kisi *layer*, sistem tidak benar-benar menunjukkan dimensi $D = 2$ atau $D = 3$ secara penuh. Keterbatasan konektivitas *layer* pada sistem *quasi* membuat dimensi sistem berada di antara 2D dan 3D, sehingga memungkinkan sistem ini memiliki dimensi fraktal (fraksional). Keberadaan dimensi fraktal membuat sistem tersebut dianggap tidak murni (*dirty-like system*), layaknya sistem dengan *impurities*; seperti sistem dengan *diluted*- (pemutusan-) atau *rewired-bonds* (penambahan-ikatan). Akibatnya, sistem *quasi*-3D akan relevan sebagai *dirty-like system* apabila eksponen α positif, $\alpha > 0$ sesuai kriteria Harris (Harris *criterion*), dan sebaliknya tak-relevan (sistem murni) jika α negatif, $\alpha < 0$ (Harris, 1974; Surungan dan Okabe, 2005). Uniknya, untuk sistem murni dengan dimensi tinggi (misalnya sistem 3D) menunjukkan α positif ($\alpha > 0$) (Xiong *et al.*, 2012; Kaupužs *et al.*, 2013), meskipun untuk model Ising nilai α sangat kecil sehingga dapat dianggap $\alpha \approx 0$ sesuai prediksi teori (Merdan dan Erdem, 2004; Kalay dan Merdan, 2007; Merdan *et al.*, 2009).

Tabel 1.1. Estimasi teoritis (simulasi) untuk temperatur dan eksponen kritis model spin *icosahedral* dan *dodecahedral* pada sistem kisi *regular* (persegi) 2D.

Sumber	Model Spin	Jumlah Keadaan (q)	T_c	Eksponen Kritis	
				ν	η
Surungan dan Okabe (2012)	<i>Icosahedral</i>	12	0.555(2)	1.31(1)	0.199(1)
Ueda <i>et al.</i> (2017)	<i>Icosahedral</i>	12	0.5550(1)	1.62(2)	
Surungan dan Okabe (2012)	<i>Dodecahedral</i>	20	0.438(1)	2.01(1)	0.149(1)
Ueda <i>et al.</i> (2020)	<i>Dodecahedral</i>	20	0.4398(8)	2.88(8)	
Yunita <i>et al.</i> (2022)	<i>Dodecahedral</i>	20	0.43(1)	3.33(1)	
Penelitian ini	<i>Dodecahedral</i>	20	0.51(2)	2.32(1)	0.58(1)



eksponen kritis suatu sistem sangat penting dilakukan untuk a kritisnya, utamanya karena parameter ini mencerminkan tem tersebut. Umumnya, sistem dengan dimensi ruang (kisi), iri kisi / titik kisi, dimensi internal (simetri) spin, jumlah keadaan spin, dan jenis interaksi yang sama cenderung akan memiliki sama (serupa), meskipun mekanismenya berbeda. Eksponen u mendekati sama) tersebut dapat digeneralisasikan ke dalam

kelas universalitas yang sama. Dengan kata lain, kelas universalitas terdiri dari sekumpulan sistem dengan eksponen kritis yang serupa meskipun keadaan mikroskopiknya berbeda. Sistem-sistem yang berada dalam satu kelas universalitas dapat menunjukkan perilaku serupa di dekat titik kritisnya. Sebagai contoh, transisi C_{3h} ke keadaan dasar (FM) untuk model *edge-cubic* 2D memiliki eksponen kritis; $\nu = 0.833(1)$ dan $\eta = 0.267(1)$ (Surungan *et al.*, 2008), dan pada transisi fase I–III (FM $\rightarrow D_3$) untuk model *truncated tetrahedral* 2D juga menunjukkan $\nu = 5/6$ dan $\eta = 4/15$ (Krcmar *et al.*, 2016), yang keduanya sangat sesuai dengan kelas universalitas Potts 2D dengan $q = 3$. Walaupun simetri dari kedua model tersebut berbeda, namun keduanya memiliki sifat kritis yang serupa sebab *degree of freedom* spinnya sama. Bahkan, pada transisi temperatur tinggi ($O_h \rightarrow C_{3h}$) untuk model *edge-cubic* 2D menunjukkan eksponen $\nu = 1.50(1)$ dan $\eta = 0.260(1)$ yang serupa dengan eksponen kritis model *icosahedral* 2D seperti yang ditunjukkan dalam Tabel 1.1, meskipun simetri kedua model sangat berbeda. Di sisi lain, model *icosahedral* dan *dodecahedral* yang jelas memiliki simetri sama; $A_5 \times C_2$, namun eksponen kritis kedua model tersebut sangat jauh berbeda (terlihat jelas dalam Tabel 1.1), sehingga keduanya memiliki kelas universalitas yang berbeda pada sistem 2D.

Tabel 1.2. Hasil estimasi teoritis (dan simulasi) untuk eksponen kritis ν , η , dan α pada sistem kisi *regular* 3D (*simple cubic*), sebagai koreksi untuk kelas universalitas Heisenberg 3D yang diperoleh dari berbagai model dan metode.

Sumber	Model Spin	Simetri	Jumlah Keadaan (q)	Eksponen Kritis		
				ν	η	α
Campostrini <i>et al.</i> (2002)	Heisenberg	$O(3)$	∞	0.7112(5)	0.0375(5)	– 0.1336(15)
Kos <i>et al.</i> (2016)	$O(N)$	$O(N = 3)$	∞	0.7121(28)	0.0386(12)	
Polsi <i>et al.</i> (2020)	$O(N), \partial^4$	$O(3)$	∞	0.7114(9)	0.0376(13)	
Hasenbusch dan Vicari (2011)	$O(N)$ -symmetric vector	$O(3)$	∞	0.7116(10)	0.0378(3)	
Hasenbusch (2001)	$O(N)$ -symmetric ϕ^4	$O(3)$	∞	0.710(2)	0.038(1)	
Kompaniets dan Panzer (2014)	$O(n)$ -symmetric ϕ^4	$O(n = 3)$	∞	0.7059(20)	0.0378(5)	– 0.118(6)
()		$\sim O(3)$	∞	0.71164(25)	0.03782(10)	
()	ral	$A_5 \times C_2$	12	0.71164(10)	0.03784(5)	
()	edral	$A_5 \times C_2$	20	0.723(19)	0.99(1)	– 0.169(57)

Pada sistem 3D (kisi *simple cubic*), model spin dengan *degree of freedom* N -dimensi cenderung memiliki eksponen kritis yang serupa untuk N yang sama. Oleh karena itu, sifat kritis dari model spin N -dimensi ini umumnya sangat sesuai dengan kelas universalitas simetri $O(N)$ sebagai simetri umumnya, walaupun simetri dan jumlah keadaan model tersebut berbeda. Misalnya model *clock* 8-keadaan ($q = 8$) dengan simetri Z_8 pada kisi *simple cubic*, memiliki eksponen kritis $\nu = 0.67169(7)$ dan $\eta = 0.03810(8)$ (Hasenbusch, 2019) yang sangat sesuai dengan eksponen kritis kelas universalitas XY (simetri $O(2)$) 3D, yaitu: $\nu = 0.67155(27)$ dan $\eta = 0.0380(4)$ (Campostrini *et al.*, 2001). Dalam Tabel 1.2, terlihat bahwa model *icosahedral* dan berbagai model simetri $O(N)$ dengan $N = 3$ pada kisi *simple cubic* juga menunjukkan eksponen kritis yang sama, sesuai dengan kelas universalitas Heisenberg (simetri $O(3)$) 3D. Berdasarkan kondisi tersebut, dapat diasumsikan bahwa sifat kritis untuk model *dodecahedral* pada kisi *simple cubic* juga akan sesuai dengan eksponen kritis kelas universalitas Heisenberg 3D.

Dalam sistem *multilayers* dengan anisotropi tinggi (seperti model spin *dodecahedral*), fluktuasi spin pada tiap *layer* (dengan konektivitas terbatas) yang saling berinteraksi dapat menghasilkan perilaku kritis; *crossover behavior* antara sistem 2D dan 3D, yang dapat dipahami melalui eksponen kritisnya. Oleh karena itu, eksponen kritis pada sistem murni 2D (kisi *square*) seperti pada Tabel 1.1 dan 3D (kisi *simple cubic*) dengan model spin *dodecahedral* perlu didefinisikan secara akurat sebagai pembanding untuk sistem *quasi*-3D. Hal ini dilakukan untuk membuktikan keberadaan sifat *crossover behavior* pada sistem tersebut; yang mana jika eksponen kritis sistem *quasi*-3D terbedakan (tak-terbedakan) secara signifikan terhadap sistem murni 2D dan 3D, maka sistem tersebut memiliki (tidak memiliki) perilaku *crossover behavior* pada daerah titik kritis. Selain itu, batasan (toleransi) jumlah *layer* dimana sistem *multilayers* dapat berperilaku seperti sistem 2D, *quasi*-3D, atau 3D penuh juga dapat diidentifikasi melalui kelas universalitas dari eksponen kritis untuk beberapa variasi jumlah *layer*. Ini terkait dengan adanya kemungkinan bahwa sistem *quasi*-3D dapat berperilaku mirip dengan sistem murni 3D pada ketebalan (jumlah *layer*) tertentu, apabila eksponen kritisnya identik (dapat digeneralisasi ke dalam kelas universalitas 3D penuh). Sifat-sifat kritis ini (termasuk eksponen kritis) dapat dihitung (dianalisis) menggunakan metode *finite size scaling* (FSS) sebagai perluasan dari teori RG. Dibandingkan dengan teori RG yang menjelaskan perilaku sistem berdasarkan skala panjang korelasi (ξ) karena ukuran sistem tak-terbatas (*infinite*), metode FSS lebih sering digunakan dalam simulasi ataupun eksperimen, sebab terbatas (*finite*).



asalah

k material *thin films* dan *multilayers* telah banyak dikaji; studi eksperimental, namun pengaruh anisotropi spin dengan

model *dodecahedral* pada sistem FM *multilayers* atau *quasi*-3D belum diteliti secara mendalam (teoritis), terutama pada eksplorasi perubahan fasenya. Bahkan belum ada hasil studi sebelumnya yang mencari dan mengkaji keberadaan sifat *crossover behavior* ketika sistem berubah dari kasus 2D ke 3D, walaupun sistem magnetik dengan struktur kisi 2D dan 3D sudah banyak diteliti. Penyelidikan *crossover behavior* dalam penelitian ini sangat penting dilakukan, sebab sifat ini mungkin hanya dapat ditemukenali pada sistem *multilayers* (*quasi*-3D) yang terbentuk dari tumpukan *layer* 2D. Keberadaan sifat *crossover behavior* dalam sistem *multilayers* dapat menjadi bukti kuat efek dimensionalitas dapat mempengaruhi sifat kritis dan termodinamis sistem magnetik. Hal ini dikarenakan keterbatasan konektivitas antar *layer* dalam sistem *quasi*-3D.

Untuk menemukenali sifat *crossover behavior* sistem, efek dari keberadaannya perlu diidentifikasi. Adapun rumusan masalah yang perlu ditelusuri untuk mengidentifikasi efek dari keberadaan sifat ini, yaitu:

1. Bagaimana sifat termodinamika sistem FM *multilayers* dengan model spin *dodecahedral*; seperti energi dalam, panas jenis, entropi, dan energi bebas sistem, dikarakterisasi secara kuantitatif?
2. Bagaimana sifat magnetik sistem FM *multilayers* dengan model spin *dodecahedral*? Apakah terdapat perubahan fase orde ke-2 pada sistem ini, dan bagaimana parameter keteraturan (*order*) seperti magnetisasi atau fungsi korelasi, digunakan untuk mengidentifikasikannya?
3. Bagaimana temperatur kritis (T_c) dan eksponen kritis sistem FM *multilayers* dengan model spin *dodecahedral* pada variasi jumlah *layer*, dan bagaimana sifat kritis dari variasi ini menggambarkan sifat *crossover behavior* sistem *quasi*-3D?
4. Bagaimana pengaruh anisotropi (model spin *dodecahedral*) dan jumlah *layer* (efek dimensionalitas) terhadap stabilitas fase FM pada sistem *multilayers*?
5. Seberapa efektif penerapan algoritma *Replica-Exchange* dalam simulasi MC untuk mengidentifikasi sifat magnetik (kritis) dan sifat termodinamik sistem FM *multilayers* dengan model spin *dodecahedral*?

1.5 Tujuan Penelitian

Fokus utama dilakukan eksplorasi sistem FM *multilayers* dengan model spin *dodecahedral* adalah untuk menemukenali adanya sifat silang (*crossover behavior*) sistem, yang disebabkan oleh kompleksitas dari sifat anisotropik dan pengaruh dimensionalitas dari kasus 2D ke sistem 3D. Untuk menemukenali sifat tersebut,



p mekanisme perubahan fase sistem ini sangat penting. Sifat sifat kritis sistem perlu dikarakterisasi dalam mekanisme. Oleh karena itu, untuk menemukenali sifat *crossover behavior* ek penting yang perlu dilakukan dan menjadi tujuan khusus dari

1. Mengarakterisasi sifat termodinamika sistem dengan melakukan pengukuran kuantitas termodinamis, seperti: energi dalam, panas jenis, entropi, dan energi bebas sistem;
2. Mengidentifikasi keberadaan perubahan fase orde ke-2 pada sistem dengan mengarakterisasi parameter keteraturan (*order*) sistem, yaitu dengan mengukur magnetisasi atau fungsi korelasinya;
3. Mengidentifikasi temperatur kritis (T_c) pada berbagai ukuran sistem berdasarkan variasi jumlah *layer* untuk menggambarkan efek dimensionalitas pada sistem *multilayers*;
4. Mengarakterisasi sifat kritis sistem dengan mengidentifikasi eksponen kritis pada berbagai ukuran berdasarkan variasi jumlah *layer* untuk menggambarkan keberadaan sifat *crossover behavior* dalam sistem *quasi-3D*; dan
5. Menganalisis pengaruh anisotropi (model spin *dodecahedral*) dan efek dimensionalitas; yang direpresentasikan dengan memvariasikan jumlah *layer* (ketebalan) sistem, terhadap stabilitas fase FM pada sistem *multilayers*.

Di sisi lain, penerapan algoritma *Replica-Exchange* dalam studi ini juga bertujuan untuk meningkatkan akurasi *sampling* dan pengukuran pada sistem FM *multilayers*, dengan sifat anisotropik dari model spin *dodecahedral* yang ditinjau.



BAB II

METODE: MODEL DAN SIMULASI

2.1 Model Spin

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. Salah satu model spin yang sudah menjadi pengetahuan umum, yaitu: model Ising. Model Ising merupakan model spin yang paling sederhana dengan simetri Z_2 ; yang menunjukkan orientasi spin hanya 2, yakni *up* ($\uparrow$) dan cerminannya, *down* ($\downarrow$).

Model Ising adalah salah satu model diskret dari model XY (spin *planar* $2d$) dengan simetri kontinu $O(2)$. Selain Ising, terdapat bentuk diskret model XY lainnya, yaitu model jam q -keadaan (*q-state clock models*) dengan simetri diskret pada rotasinya dan model Potts (simetri diskret pada permutasinya) (Yunita *et al.*, 2022). Model jam berlaku untuk $q \geq 2$ namun untuk $q = 2$ sama saja dengan model Ising. Dalam sistem spin $2d$, model Potts juga dikenal sebagai Potts *planar* yang sama dengan model jam, namun model Potts bisa juga berlaku sebagai model diskret dari sistem spin $3d$, model Heisenberg (simetri kontinu $O(3)$).

Model Heisenberg merupakan generalisasi dari model XY ($2d$) dalam sistem $3d$. Secara umum, Hamiltonian dari model ini diberikan sebagai berikut

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j , \quad (2.1)$$

dimana J_{ij} adalah konstanta interaksi pasangan yang nilainya tetap $J_{ij} = J > 0$ untuk kasus feromagnetik (FM). Notasi $\sum$ menyatakan banyaknya interaksi yang menunjukkan ukuran kisi sistem, dan $\vec{s}_i$ merupakan spin dalam vektor $3d$ yang menempati titik kisi ke- i , sedangkan indeks $i, j = 1, 2, \dots, N$ titik kisi. Sebuah spin $\vec{s}$ memiliki 3 komponen, $\vec{s} = \{s^x, s^y, s^z\}$ dengan panjang vektor satuannya adalah

$$s^x = \cos \theta \cos \varphi , \quad (2.2)$$

$$s^y = \sin \theta \cos \varphi , \quad (2.3)$$

$$s^z = \sin \varphi , \quad (2.4)$$

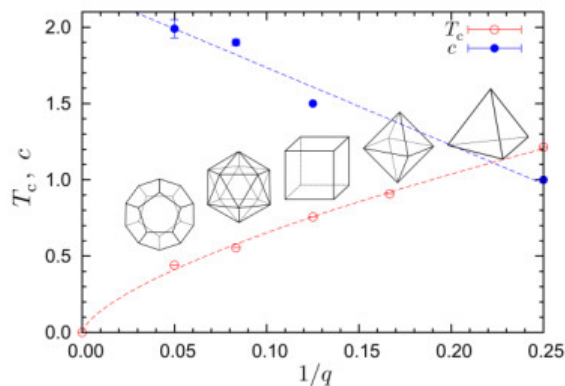
dan $\varphi \in [0; \pi]$.



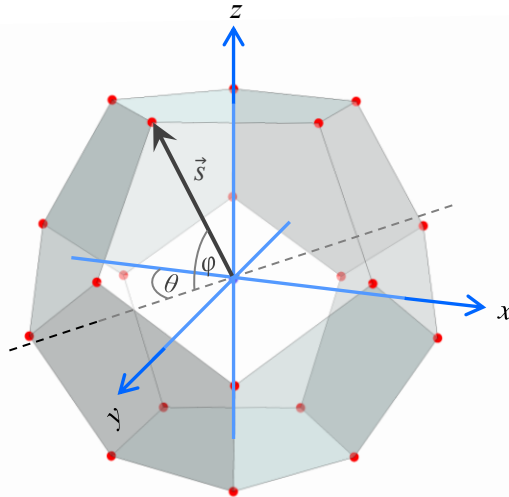
Tabel 2.1. Karakteristik *polyhedral* beraturan (*Platonic solids*).

Tipe <i>Polyhedral</i>	Vertices (Titik Sudut)	Faces (Sisi)	Edges (Rusuk)	Kelompok Simetri
<i>Tetrahedral</i>	4	4	6	S_4
<i>Octahedral</i>	6	8	12	$O_h = S_4 \times C_2$
<i>Hexahedral</i> (Kubus)	8	6	12	O_h
<i>Icosahedral</i>	12	20	30	$A_5 \times C_2$
<i>Dodecahedral</i>	20	12	30	$A_5 \times C_2$

Sama halnya dengan model diskret dari model XY, model Heisenberg juga dapat didiskretisasi ke dalam simetri diskret *polyhedral*. Terdapat lima jenis *polyhedral* beraturan yang juga dikenal sebagai *Platonic Solids*, yaitu *tetrahedral*, *octahedral*, *hexahedral* (kubus), *icosahedral*, dan *dodecahedral* (MacLean, 2002). Karakteristik untuk setiap jenis *polyhedral* tersebut disajikan dalam Tabel 2.1. Dalam model *polyhedral*, umumnya orientasi sebuah spin digambarkan sebagai suatu vektor yang mengarah ke salah satu titik sudut (*vertex*) *polyhedral* dari titik pusat strukturnya. Selain titik-titik sudut (*vertices*), suatu spin $\vec{s}$ dapat pula diorientasikan pada titik pusat salah satu sisi (*face*) dari strukturnya atau pada titik tengah salah satu rusuknya (*edge*); contohnya model spin *edge-cubic* (jumlah keadaan $q = 12$) yang telah diteliti oleh Surungan *et al.* (2008). Namun, berdasarkan simetrinya, model spin *face-polyhedral* mirip dengan model umum *polyhedral*; misalnya model *face-octahedral* sama dengan model kubus (*hexahedral*), begitupun sebaliknya.

**Gambar 2.1.** Temperatur kritis, T_c dan muatan inti c spin *polyhedral* beraturan (Ueda *et al.*, 2020).

n *polyhedral* 2D untuk kasus feromagnet, menunjukkan adanya kedua (Surungan dan Okabe, 2012). Berdasarkan penelitian dan Okabe (2012) menyimpulkan bahwa temperatur kritis T_c sistematis mengalami penurunan seiring dengan meningkatnya



Gambar 2.2. Model spin *dodecahedral*.

jumlah keadaan spin (*q-state*). Hal ini juga diperjelas kembali oleh Ueda *et al.* (2020) bahwa sifat penurunan T_c pada kasus ini sesuai dengan fakta, yakni $T_c \rightarrow 0$ untuk q yang sangat besar ($q \rightarrow \infty$; model Heisenberg klasik 2D). Sebaliknya, muatan inti c model spin *polyhedral* ini mengalami peningkatan seiring dengan meningkatnya q , sebagaimana yang ditunjukkan pada Gambar 2.1.

Penelitian ini hanya difokuskan pada model spin *dodecahedral*. Berdasarkan karakteristik dan sifatnya, model ini yang paling mendekati model Heisenberg dibandingkan model *polyhedral* lainnya dengan jumlah keadaan $q = 20$. Spin dalam model ini diorientasikan pada salah satu dari 20 *vertices dodecahedral* seperti yang ditampilkan pada Gambar 2.2. Untuk model *dodecahedral* (beraturan), sudut-sudut θ dan φ bernilai diskret; yang besarnya adalah sebagai berikut:

$$\theta_n = \left\{ \frac{n\pi}{5} \right\}, \quad (2.5)$$

$$\varphi_{\pm} \approx \{\pm 10.81^\circ, \pm 52.62^\circ\}, \quad (2.6)$$

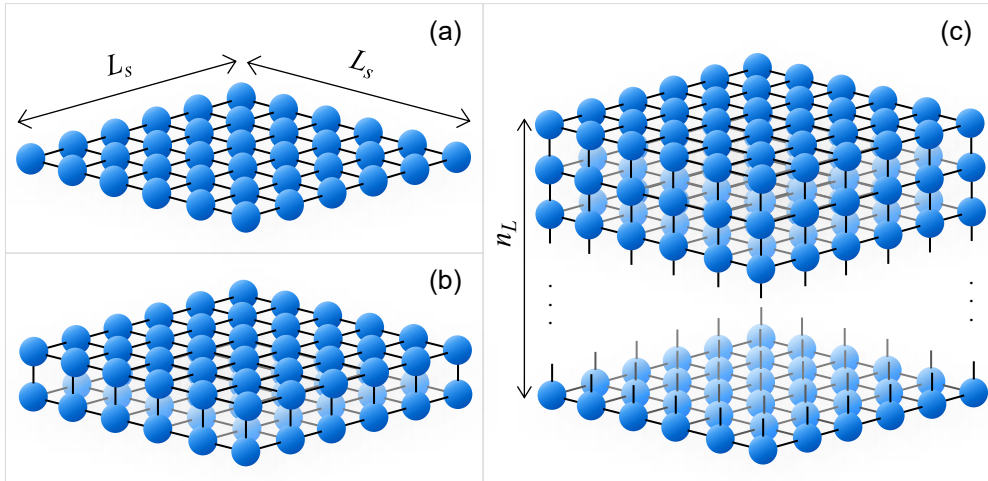
dimana $n = 1, \dots, 10$. Bagaimanapun, model spin *dodecahedral* adalah pilihan terbaik sebagai diskretisasi model Heisenberg karena memiliki jumlah keadaan terbesar. Pada temperatur rendah (*groundstate*) untuk kasus FM, spin-spin dalam ilih satu orientasi spin dari 20 kemungkinan keadaan.



a Dimensi

m suatu material (*condensed matter*) digambarkan melalui material *thin film* (film tipis) yang digambarkan ke dalam sistem *bulk* (penuh) yang digambarkan dalam sistem kisi 3D. Selain

itu, struktur kisi juga merepresentasikan interaksi dari partikel-partikel (atom-atom atau molekul-molekul) penyusunnya. Dalam sistem magnetik, titik-titik kisi ditempati oleh spin. Spin-spin yang berinteraksi dan tersusun pada struktur kisi tertentu akan menggambarkan sifat kemagnetan suatu material. Struktur kisi yang paling sederhana dalam sistem kisi 2D dan 3D masing-masing adalah kisi persegi (*square*) dan kisi kubik (*simple cubic*).



Gambar 2.3. Ilustrasi sistem kisi *quasi*-3D yang meliputi; (a) *single layer*, (b) *2-layers* (*bilayers*), dan (c) n_L -*layers* (*multilayers*).

Pada penelitian ini, sistem kisi yang ditinjau adalah kisi 2D sederhana (kisi *square*) yang ditumpuk atau disusun secara *vertical* membentuk sistem 3D (bukan *simple cubic*). Sebuah kisi *square* 2D dikenal sebagai *single layer* (satu lapisan), sedangkan untuk kisi *square* yang ditumpuk dalam jumlah tertentu disebut sebagai *multilayers* (banyak-lapisan). Kisi *multilayers* ini merepresentasikan sistem kisi *quasi*-3D yang diilustrasikan pada Gambar 2.3. Ukuran sistem merepresentasikan jumlah spin yang menempati titik kisi yang didefinisikan sebagai berikut

$$N \equiv L_s \times L_s \times n_L, \quad (2.7)$$

dimana L_s adalah ukuran *linear* kisi *square*, sedangkan n_L menyatakan banyaknya lapisan (*number of layers*). Dalam penelitian ini, jumlah lapisan (n_L) merupakan variabel yang divariasikan nilainya dari $n_L = 1$ hingga $n_L < L_s$ untuk sistem *quasi*-3D. Untuk $n_L = 1$ sistem murni berkisi *square* 2D (Gambar 2.3(a)), sedangkan

kisi *simple cubic* 3D) ketika $n_L = L_s$. Oleh karena itu, variasi n_L jadinya perubahan sistem dari kasus 2D ke 3D yang dapat persilangan (*crossover behavior*) sistem tersebut.

Dengan sifat sistem tersebut, penjumlahan pada persamaan (2.1) ap semua spin pasangan interaksi (tetangga terdekat) untuk yang didasarkan pada nilai-nilai n_L . Penjumlahan tersebut



diterapkan pada sistem kisi dengan syarat tepi periodik (*periodic boundary condition*). Pada keadaan dasar (*groundstate*), energi dasar sistem adalah; $-2NJ$ untuk *single layer*, $-3NJ$ untuk *multilayers* ($n_L > 2$), dan $-\frac{5}{2}NJ$ terkhusus untuk kisi *bilayers* (2-layers).

2.3 Simulasi Monte Carlo

Metoda komputasi (simulasi komputer) merupakan sebuah metode yang sangat berperan penting dalam menyelesaikan berbagai masalah fisis dengan sistem *complex* atau rumit yang tidak dapat diselesaikan secara analitik. Sifat-sifat fisis dari sistem ini dapat ditelusuri dan diamati menggunakan simulasi komputer. Selain itu, simulasi komputer juga dapat menjadi suatu metoda eksperimen komputer untuk memahami perilaku suatu sistem yang telah mengalami perubahan. Dengan kata lain, simulasi komputer memiliki pengaruh besar terhadap hubungan antara teori dengan eksperimen dan pengukuran sesungguhnya (*real experiment*). Salah satu metoda simulasi yang umumnya digunakan untuk menyelesaikan sistem *complex*; seperti sistem banyak partikel (*many-body problems*), yaitu simulasi Monte Carlo.

Simulasi Monte Carlo (MC) adalah sebuah metode *sampling* (pengambilan sampel) standar dalam mekanika statistik, yang pendeskripsianya mengarah pada sifat probabilistik dengan memanfaatkan bilangan acak (*random number*). Dalam praktiknya, bilangan acak ini merupakan *pseudo-random numbers*; yaitu bilangan yang diperoleh dari proses deterministik, misalnya pembangkitan bilangan acak dari sistem algoritma komputer (Surungan, 2000).

Kuantitas-kuantitas (besaran-besaran) fisis dihitung dengan menggunakan simulasi MC. Dalam mekanika statistik, untuk menghitung kuantitas fisis suatu sistem dilakukan dengan menerapkan rerata termal (*thermal average*), sebab adanya kemungkinan muncul konfigurasi (*microstate*) yang berbeda pada satu titik temperatur yang sama. Karena itu, jika terdapat sejumlah M *microstates*, maka rerata termal dari suatu besaran Q dapat didefinisikan sebagai berikut (Surungan, 2000)

$$\langle Q \rangle_T \equiv \sum_{j=1}^M Q_j p_j, \quad (2.8)$$

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*

probabilitas kemunculan konfigurasi ke- j tersebut dalam suatu rerata ensemble sebagai berikut:

$$p_j \equiv \frac{e^{-\beta E_j}}{Z}; \quad Z = \sum_j e^{-\beta E_j}, \quad (2.9)$$



dimana E_j adalah energi dari konfigurasi ke- j , yang dihitung menggunakan persamaan (2.1). Z merupakan fungsi partisi, sedangkan $1/\beta = kT^2$, dengan k adalah tetapan Boltzmann dan T adalah variabel temperatur.

Karena melibatkan seluruh *microstate* sistem; misalnya 2^N konfigurasi untuk model Ising (model paling sederhana) atau 20^N konfigurasi untuk model spin *dodecahedral*, sehingga perhitungan persamaan (2.8) membutuhkan memori komputer yang sangat besar dan waktu yang sangat lama. Untuk menghindari hal ini, maka digunakan metoda *sampling*. Oleh karena itu, perhitungan suatu kuantitas fisis dilakukan dengan metode simulasi MC, yaitu dengan mengambil beberapa sampel (*microstate*) yang dibangkitkan secara acak, kemudian dilakukan perataan termal (*thermal averaging*). Sampel-sampel yang acak tersebut dibangkitkan melalui proses Markov; yaitu pembangkitan konfigurasi baru berdasarkan konfigurasi sebelumnya, sehingga menghasilkan rantai Markov (Markov *chain*). Untuk membuat satu rantai Markov, digunakan algoritma dasar dari metode MC, yaitu algoritma Metropolis. Jika terdapat sebanyak M_s konfigurasi (sampel) dalam rantai Markov, maka probabilitas munculnya satu konfigurasi menjadi $p_j \cong P(w_j) = 1/M_s$. Dengan demikian, suatu besaran fisis Q dapat dihitung dengan pendekatan berikut

$$\langle Q \rangle_{M_s} = \frac{1}{M_s} \sum_{j=1}^{M_s} Q_{w_j} \quad (2.10)$$

Dalam metode simulasi MC, terdapat berbagai macam algoritma; misalnya yang paling dasar, yakni algoritma Metropolis, dan banyak lagi algoritma lainnya yang dikembangkan untuk menangani beragam sistem. Setiap algoritma memiliki kelebihan dan kegunaannya masing-masing sesuai dengan sistem yang diamati, contohnya algoritma *Replica-Exchange* yang umumnya digunakan untuk menangani sistem *complex* seperti spin *glass* (SG). Dalam penelitian ini, digunakan algoritma Metropolis yang dikombinasikan dengan algoritma *Replica-Exchange*; yang secara umum hanya dikenal sebagai metoda *Replica-Exchange*, sebab pada dasarnya metoda ini menggunakan algoritma Metropolis untuk membangkitkan konfigurasi baru dalam simulasi MC.

2.3.1 Algoritma Metropolis

Algoritma Metropolis merupakan algoritma yang paling dasar dan umum dalam metoda simulasi MC.



Dalam algoritma ini, semua sampel dibangkitkan untuk setiap sistem yang akan diamati, yang kemudian membentuk sebuah rantai Markov tersebut. Sederet konfigurasi dalam rantai Markov dibangkitkan dengan kriteria Metropolis dengan pembaruan (*update*) spin tunggal. Konfigurasi terbaru (*updated configuration*) dibangkitkan secara acak berdasarkan konfigurasi sebelumnya (*old configuration*) dengan matriks transisi yang memenuhi syarat kesetimbangan (*balance condition*) berikut

$$p_a W(a \rightarrow b) = p_b W(b \rightarrow a) . \quad (2.11)$$

Rasio transisi bergantung pada perubahan energi konfigurasinya yang dinyatakan sebagai

$$\frac{W(a \rightarrow b)}{W(b \rightarrow a)} = \frac{p_b}{p_a} = e^{-\beta(E_b - E_a)} . \quad (2.12)$$

Berdasarkan nilai rasio pada persamaan (2.12), maka dapat dipilih probabilitas transisi dari konfigurasi awal menjadi konfigurasi baru; yang diberikan sebagai

$$W(a \rightarrow b) = \begin{cases} e^{-\beta(E_b - E_a)} , & \text{untuk } E_b > E_a , \\ 1 , & \text{selain itu .} \end{cases} \quad (2.13)$$

Persamaan (2.13) juga dikenal sebagai kriteria Metropolis (*Metropolis criterion*); yang dalam simulasi MC, probabilitas diterimanya suatu konfigurasi baru biasanya dituliskan sebagai

$$P(E_a \rightarrow E_b) = \min[1, e^{-\beta\Delta E}] , \quad (2.14)$$

dimana $\Delta E = E_b - E_a$; dengan E_a dan E_b masing-masing adalah energi konfigurasi lama dan baru (*update*). Konfigurasi terbaru secara otomatis diterima jika $E_b \leq E_a$ atau $\Delta E \leq 0$ (Yunita *et al.*, 2022). Sedangkan jika $\Delta E > 0$, bilangan acak $0 < r_n < 1$ dibangkitkan dan konfigurasi baru akan diterima jika $r_n < e^{-\beta\Delta E}$, namun jika tidak sesuai dengan kriteria tersebut; spin di-*update* kembali untuk membangkitkan kembali konfigurasi baru hingga konfigurasi terbaru tersebut memenuhi kriteria Metropolis ini. Karena pada penelitian ini digunakan algoritma *Replica-Exchange*, maka konfigurasi baru untuk pengukuran dalam simulasi MC di-*update* lagi menggunakan metoda *Replica-Exchange*.

2.3.2 Metoda *Replica-Exchange*

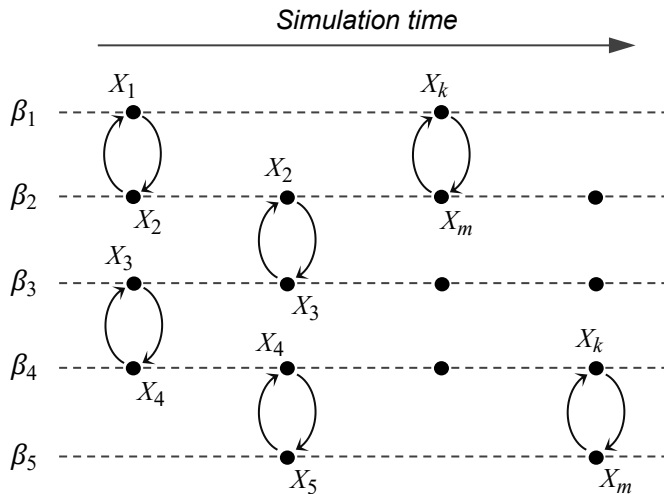
Algoritma *Replica-Exchange* merupakan algoritma dalam simulasi MC yang paling ampuh (*powerful*) yang mulanya diperkenalkan untuk mengatasi masalah sistem *complex*; seperti sistem frustrasi secara acak (*randomly frustrated*) (Surungan *et al.*, 2018) atau sistem SG (Surungan *et al.*, 2015; Surungan, 2016). Sistem *complex* yang dimaksudkan adalah sistem yang memungkinkan adanya energi terendah lokal (*local minima*) pada lanskap energinya, sehingga penelusuran acak (*random walker*) dapat ak pada energi *local minima* tersebut.



ini, algoritma *Replica-Exchange* diterapkan pada sistem yang em *ferromagnet* (FM). Penerapan metoda ini murni bertujuan hasil pengukuran yang lebih akurat dibandingkan dengan hanya a Metropolis yang standar. Utamanya untuk dua sistem atau si; dimana pada energi *minima* (*groundstate*), suatu sistem

memiliki banyak kemungkinan orientasi spin (untuk model *dodecahedral*; ada 20 pilihan orientasi spin); maka metoda *Replica-Exchange* sangat berperan besar disini.

Ide dasar dari algoritma *Replica-Exchange* ini adalah untuk meningkatkan performa algoritma Metropolis konvensional dengan menyalin sistem asli (*original*) menjadi beberapa replika (*Replicas*). Setiap replika disimulasikan secara bebas terhadap algoritma Metropolis standar. Oleh karena itu, simulasi ini berjalan secara paralel; dimana replika dari dua temperatur yang berdekatan saling dipertukarkan (*Exchanged*). Sebagai contoh, jika terdapat K replika, maka pertukaran pertama dibangun berdasarkan pasangan replika: X_1 dengan X_2 , X_3 dengan X_4 , ..., dan X_{K-1} dengan X_K ; selanjutnya untuk pertukaran berikutnya dibangun oleh pasangan: X_2 dengan X_3 , X_4 dengan X_5 , ..., dan X_{K-2} dengan X_{K-1} ; yang diilustrasikan secara jelas pada Gambar 2.4. Pertukaran ini merupakan cara dalam algoritma *Replica-Exchange* agar *random walker* dapat terlepas dari energi *local minima*. Disini, X menyimbolkan replika yang juga merepresentasikan energi dari konfigurasi replika, sehingga dapat dituliskan: $X_k = E_k$.



Gambar 2.4. Ilustrasi algoritma *Replica-Exchange* pada dua titik temperatur yang berdekatan. Titik solid (●) merepresentasikan replika X .

Probabilitas distribusi replika dari pengamatan keseluruhan sistem dalam $\{E_2, \dots, E_K\}$ diberikan oleh

$$P(\{E_k, \beta_k\}) \equiv \prod_{k=1}^K \frac{e^{-\beta_k E_k}}{Z(\beta_k)}, \quad (2.15)$$



fungsi partisi pada replika ke- k . Matriks pertukaran (*exchange* replika didefinisikan sebagai; $W(E_k, \beta_k | E_m, \beta_m)$, yang juga

merupakan probabilitas untuk memperbarui sistem asli dengan menukarkan konfigurasi E_k pada β_k dengan konfigurasi E_m pada β_m . Agar seluruh sistem tetap seimbang, maka matriks pertukaran harus memenuhi *balance condition* berikut

$$\begin{aligned} & P(\{E_k, \beta_k\}, \dots, \{E_m, \beta_m\}, \dots) \cdot W(E_k, \beta_k | E_m, \beta_m) \\ &= P(\{E_m, \beta_k\}, \dots, \{E_k, \beta_m\}, \dots) \cdot W(E_m, \beta_k | E_k, \beta_m). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Dengan menggunakan persamaan (2.15), diperoleh rasio;

$$\frac{W(E_k, \beta_k | E_m, \beta_m)}{W(E_m, \beta_k | E_k, \beta_m)} = e^{-\Delta}, \quad (2.17)$$

dimana $\Delta = (\beta_m - \beta_k)(E_k - E_m)$. Dengan demikian, probabilitas transisi dari pertukaran replika ini diberikan sebagai

$$W(E_k, \beta_k | E_m, \beta_m) = \min[1, e^{-\Delta}], \quad (2.18)$$

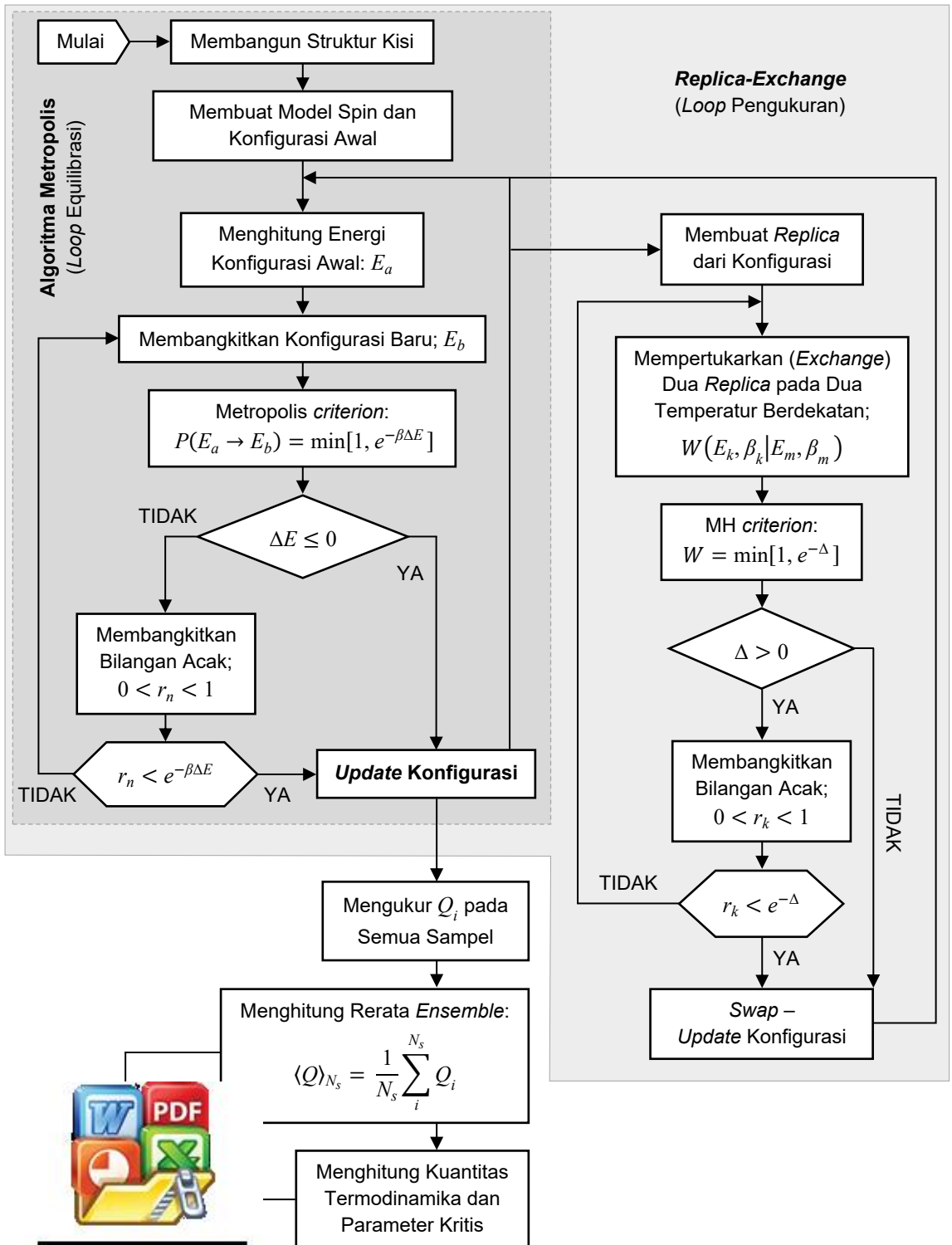
dimana pertukaran replika untuk pembaruan konfigurasi pada sistem asli secara otomatis diterima jika $\Delta < 0$. Sedangkan untuk $\Delta > 0$, pertukaran replika diterima jika memenuhi kriteria $r_k < e^{-\Delta}$; dengan $0 < r_k < 1$ adalah bilangan acak yang dibangkitkan dalam algoritma *Replica-Exchange*, dan otomatis ditolak jika tidak memenuhi kriteria ini. Karena pertukaran ini hanya dilakukan antara replika pada temperatur ke- k dengan replika pada temperatur berikutnya, maka $m = k + 1$, sehingga berlaku; $W(E_k, \beta_k | E_{k+1}, \beta_{k+1})$. Persamaan (2.18) sebagai probabilitas transisi diterimanya pertukaran dua replika juga dikenal sebagai kriteria Metropolis-Hastings (MH *criterion*). Seluruh konfigurasi pada sistem asli dari simulasi ini diperbarui berdasarkan semua hasil dari proses replika dan pertukarannya.

Dalam menjalankan simulasi MC, satu kali simulasi penuh sebanding dengan satu Monte Carlo *step* (MCS) yang didefinisikan sebagai kunjungan dan pembaruan tiap spin sekali untuk setiap replika. Jumlah MCS yang diterapkan sama dengan jumlah konfigurasi yang dibangkitkan dalam rantai Markov; yaitu M_s , untuk setiap titik temperatur. Pada penelitian ini, diambil sejumlah sampel, N_s dari total MCS yang ada, M_s . Berdasarkan pada pendekatan ini, rerata *ensemble* pada persamaan (2.10) dituliskan menjadi

$$\langle Q \rangle_{N_s} = \frac{1}{N_s} \sum_i^{N_s} Q_i, \quad (2.19)$$



esar nilai Q pada sampel ke- i , dengan jumlah sampel yang $M_s/5$. Agar sebaran datanya lebih merata, maka sampel yang pel pada kelipatan ke-5. Sebelum melakukan pengukuran,



lengkap simulasi MC dengan algoritma *Replica-Exchange*. Satu *loop* sebanding dengan satu MCS untuk menghasilkan satu nilai besaran Q pada semua titik temperatur.

terlebih dahulu dilakukan simulasi dengan sejumlah MCS awal ($\sim 10^3$ hingga $\sim 10^4$) untuk kestabilan (equilibrasi) sistem. Setelah sistem mencapai kestabilan, dilakukan simulasi pengukuran dengan total M_s MCS untuk setiap temperatur. Satu kali pengukuran tunggal dibangun dari rerata data; dengan total data $M_s/5$ sampel untuk setiap titik temperatur. Data pengukuran tunggal dikumpulkan hingga 200 pengukuran untuk setiap ukuran sistem, agar kesalahan (*error*) pengukuran statistik menjadi sangat kecil (*minimum*). Dengan demikian, setiap data yang diukur diperoleh dari rata-rata $40 \times M_s$ sampel yang dapat dikonfirmasi sebagai hasil akhir dari seluruh pengukuran. Dalam penelitian ini, diambil MCS awal 2×10^4 dan MCS untuk pengukuran adalah $M_s = 2 \times 10^5$.

