

**DESAIN KOMPUTASI KRISTAL-MOLEKULER DAN
APLIKASINYA: SIMULASI KUANTUM BERBASIS *DENSITY*
FUNCTIONAL THEORY (DFT)**



UNIVERSITAS GADJAH MADA

**Pidato Pengukuhan Jabatan Guru Besar
dalam bidang ilmu Desain Komputasi Kristal dan Molekuler
Pada Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Gadjah Mada**

**Disampaikan pada Pengukuhan Guru Besar
Universitas Gadjah Mada
Tanggal 12 Desember 2024**

**Oleh:
Prof. Sholihun, S.Si., M.Sc., Ph.D.Sc.**

Bismillaahirrahmaanirrahiim

Yang saya hormati:

Ketua, Sekretaris, dan Anggota Majelis Wali Amanat Universitas Gadjah Mada;

Rektor dan Wakil Rektor Universitas Gadjah Mada;

Ketua, Sekretaris, dan Anggota Dewan Guru Besar Universitas Gadjah Mada;

Ketua, Sekretaris, dan Anggota Senat Akademik Universitas Gadjah Mada;

Para Dekan, Wakil Dekan, dan Ketua Lembaga/Unit di Universitas Gadjah Mada;

Seluruh civitas akademika Universitas Gadjah Mada;

Para tamu undangan, kerabat, serta hadirin yang saya hormati.

Assalamu'alaikum warahmatullahi wabarakatuh

Selamat pagi, salam sejahtera untuk kita semua

Segala puji dan syukur kita panjatkan kepada Allah *Subhanahu Wa Ta'ala* (Swt) atas limpahan Rahmat-Nya sehingga pagi ini kita dapat berkumpul dalam pidato pengukuhan jabatan Guru Besar Universitas Gadjah Mada. Pada kesempatan ini, saya ingin menyampaikan terima kasih kepada Pimpinan Dewan Guru Besar atas kepercayaan yang diberikan kepada saya untuk menyampaikan pidato pengukuhan sebagai Guru Besar bidang ilmu Desain Komputasi Kristal dan Molekuler di Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gadjah Mada (TMT 1 Maret 2024, sesuai dengan SK Kemdikbudristek Nomor 54431/M/07/2024 tanggal 17 Mei 2024).

Pimpinan sidang dan hadirin yang saya hormati,

Pada kesempatan yang berbahagia ini, perkenankan saya untuk menyampaikan pidato ilmiah dengan judul:

Desain Komputasi Kristal-Molekuler dan Aplikasinya: Simulasi Kuantum Berbasis *Density Functional Theory* (DFT)

Perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi telah membawa kita ke era desain dan prediksi sifat material dapat dilakukan dengan tingkat presisi tinggi, bahkan sebelum material tersebut disintesis di

laboratorium. Hal ini sangat mungkin dilakukan berkat kemajuan dalam komputasi dan teori kuantum, yang memungkinkan para ilmuwan memodelkan dan menyimulasikan perilaku atom dan molekul pada skala nano. Salah satu pendekatan yang akurat dan telah teruji dalam memodelkan sifat-sifat material pada tingkat atomik yaitu *density functional theory* (DFT) [Reshak *et al.*, 2011].

Seiring dengan berkembangnya kebutuhan material baru dengan sifat yang unik dan disesuaikan untuk aplikasi tertentu, eksperimen biasanya melibatkan siklus panjang dari sintesis, karakterisasi, dan uji coba material untuk memahami sifat-sifatnya. Proses ini bisa membutuhkan waktu panjang dan biaya besar. Di sinilah peran desain komputasi menjadi krusial. Dengan menggunakan metode komputasi, kita dapat memprediksi dan merancang sifat material secara virtual sebelum material tersebut dibuat secara fisik. Desain komputasi material memanfaatkan prinsip-prinsip fisika, kimia, dan matematika untuk membangun model yang dapat menggambarkan perilaku atom-atom dalam material yang berinteraksi satu sama lain, bagaimana mereka tersusun, dan bagaimana perilaku mereka di bawah kondisi tertentu seperti tekanan, suhu, dan medan magnet [Sholl dan Steckel, 2009; Hoja *et al.*, 2016].

Kristal dan molekul adalah dua bentuk dasar dari materi yang memiliki sifat yang sangat berbeda, namun saling melengkapi dalam banyak aplikasi teknologi. Kristal, yang merupakan susunan periodik atom atau molekul dalam tiga dimensi, memiliki sifat fisik yang sangat bergantung pada simetri dan struktur atom [Hartmann, 2001]. Di sisi lain, molekul, yang terbentuk dari ikatan kimia antar atom, memiliki sifat kimia dan fisik yang dapat sangat bervariasi tergantung pada komposisi dan konfigurasi ikatan atom. Komputasi kristal-molekuler digunakan untuk memodelkan dan menganalisis perilaku atom dalam kristal dan molekul. Ini mencakup prediksi struktur kristal, energi total sistem, serta sifat-sifat elektronik, optik, dan mekanik [Sholl dan Steckel, 2009; Beran, 2016]. Dengan memanfaatkan simulasi kuantum, kita dapat memprediksi bagaimana kristal dan molekul akan berperilaku dalam kondisi yang berbeda, yang sangat penting dalam pengembangan material baru. Simulasi kuantum memungkinkan kita

mempelajari dan memprediksi sifat material dengan memperhitungkan efek kuantum yang sering kali tidak teramati dalam pendekatan klasik. Simulasi kuantum memungkinkan untuk menghitung fungsi gelombang dan distribusi probabilitas elektron dalam material [Georgescu *et al.*, 2014]. Dengan informasi ini, kita dapat memprediksi sifat-sifat material seperti energi, densitas elektron, dan interaksi antar atom [Macchi, 2009; Zhou *et al.*, 2016; Alipour & Badooei, 2018]. Simulasi kuantum yang dimaksud menggunakan konsep kuantum dengan mempertimbangkan interaksi antar elektron beserta efek korelasi dan pertukaran. Di antara metode yang mengadopsi dua efek ini adalah DFT, yang mengantarkan Walter Kohn dan John A. Pople meraih Hadiah Nobel di bidang Kimia pada tahun 1998 atas kontribusi mereka dalam pengembangan DFT serta metode komputasi berbasis kuantum. Metode ini memungkinkan untuk menghitung energi total sebuah sistem berdasarkan densitas elektron, bukan fungsi gelombang. DFT memanfaatkan prinsip bahwa semua sifat kuantum dari sebuah sistem dapat diturunkan dari densitas elektron, yang merupakan fungsi dari posisi dalam ruang [Martin, 2004].

Bapak, Ibu dan hadirin yang saya hormati,

PRINSIP DASAR DFT

DFT adalah metode komputasi yang banyak digunakan dalam fisika dan kimia kuantum untuk mempelajari struktur elektronik serta sifat-sifat sistem multi-elektron. Keunggulan utama DFT terletak pada kemampuannya untuk menyimulasikan sistem dengan banyak elektron secara efisien, sehingga dapat memodelkan material kompleks seperti logam, semikonduktor, dan sistem molekuler [Grimme *et al.*, 2007; Soleimani-Amiri *et al.*, 2024; Syariati *et al.*, 2020]. Metode ini didasarkan pada prinsip bahwa energi total suatu sistem dapat dinyatakan sebagai fungsi dari densitas elektron, bukan dari fungsi gelombang yang lebih kompleks [Martin, 2004]. DFT menyederhanakan perhitungan interaksi antar elektron dalam suatu sistem dan interaksinya dengan inti atom. Tantangan besar dalam sistem multi-elektron adalah menyelesaikan persamaan Schrödinger yang kompleksitasnya meningkat seiring bertambahnya jumlah

elektron dalam sistem. Usaha menghitung fungsi gelombang untuk semua elektron dalam sistem besar memerlukan sumber daya komputasi yang sangat besar, bahkan untuk sistem sederhana seperti molekul H_2O .

DFT didasarkan pada dua prinsip fundamental yang diperkenalkan oleh Pierre Hohenberg dan Walter Kohn pada tahun 1964. Prinsip pertama menyatakan bahwa energi total sistem multi-elektron dapat direpresentasikan sebagai fungsi unik dari densitas elektron $\rho(r)$. Densitas elektron hanya bergantung pada tiga koordinat spasial, sehingga perhitungan menjadi lebih sederhana. Prinsip kedua, yang dikenal sebagai Teorema Hohenberg-Kohn, menyatakan bahwa densitas elektron dalam sebuah sistem menentukan seluruh sifat fisik sistem tersebut. Jika densitas elektron diketahui, energi total dan parameter lain yang mewakili sifat material lainnya dapat diketahui tanpa melalui penyelesaian fungsi gelombang secara eksplisit [Igumbor, 2017].

Pada tahun 1965, Kohn dan Sham memperkenalkan pendekatan yang praktis untuk menghitung energi total dalam DFT yang disebut sebagai Persamaan Kohn-Sham. Mereka mengusulkan sistem fiktif yang terdiri dari elektron-elektron yang tidak berinteraksi, tetapi menghasilkan densitas elektron yang dapat mewakili sistem asli. Pendekatan ini menguraikan masalah menjadi orbit satu elektron, yang dikenal sebagai orbital Kohn-Sham, sehingga perhitungan dalam DFT menjadi lebih sederhana tanpa mengurangi akurasi prediksi energi total dan sifat sistem multi-elektron [Kohn dan Sham, 1965].

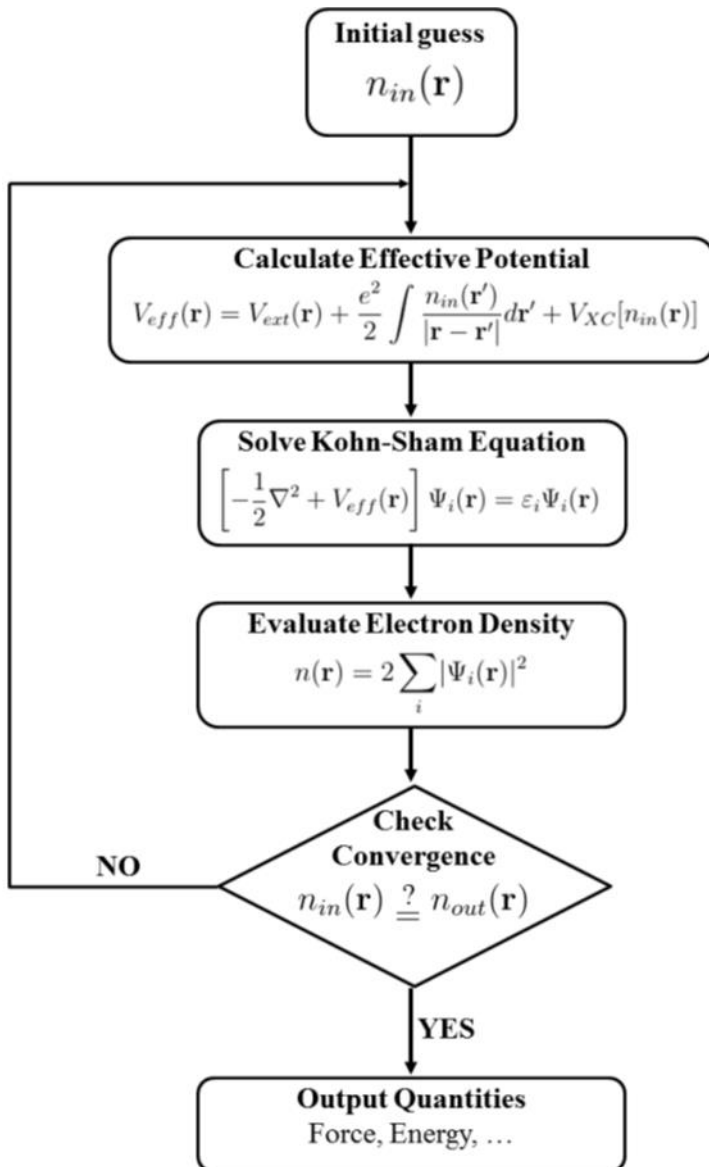
Dalam mekanika kuantum, perilaku elektron dalam sistem multi-elektron dijelaskan oleh persamaan Schrödinger N-elektron, dengan fungsi gelombang $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ dan energi total E . Fungsi gelombang ini mengandung informasi lengkap mengenai semua elektron dalam sistem. Namun penyelesaiannya sangat sulit karena adanya interaksi antar-elektron. Untuk sistem dengan banyak elektron, menyelesaikan persamaan Schrödinger secara langsung menjadi masalah komputasi yang sangat kompleks. DFT melalui penyelesaian Persamaan Kohn-Sham menjadi sebuah solusi. Persamaan Kohn-Sham yang dimaksud dituliskan sebagai berikut:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})\right)\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}) \quad (1)$$

dengan

$$V_{\text{eff}}(r) = V_{\text{ext}}(r) + V_{\text{H}}(r) + V_{\text{XC}}(r)$$

Pada persamaan (1) $\psi_i(\mathbf{r})$ adalah orbital Kohn-Sham untuk elektron ke- i , ε_i adalah energi orbital tersebut. $V_{\text{eff}}(r)$ adalah potensial efektif yang mencakup $V_{\text{ext}}(r)$ (potensial eksternal, interaksi elektron dengan inti atom, $V_{\text{H}}(r)$ (potential Hartree, interaksi antar-elektron melalui densitas elektron), $V_{\text{XC}}(r)$ (potensial pertukaran dan korelasi, yang mewakili efek pertukaran dan korelasi akibat interaksi elektron-elektron).



Gambar 1. Diagram alir penyelesaian Persamaan Kohn-Sham

Penyelesaian persamaan Kohn-Sham dalam DFT dilakukan melalui metode iteratif yang dikenal sebagai SCF (*self-consistent field*) (Gambar 1). Proses dimulai dengan menetapkan tebakan awal untuk

densitas elektron, diikuti dengan perhitungan potensial efektif yang mencakup potensial eksternal, potensial Coulomb, dan potensial pertukaran-korelasi. Selanjutnya, persamaan Kohn-Sham diselesaikan untuk memperoleh orbital Kohn-Sham. Dari orbital ini, densitas elektron baru (persamaan (2)) dihitung menggunakan:

$$\rho(r) = \sum_i |\psi_i(r)|^2 \quad (2)$$

Proses ini diulang hingga densitas elektron mencapai konvergensi, yaitu ketika perbedaan antara densitas awal dan densitas baru menjadi minimal. Setelah mencapai konvergensi, energi total sistem dapat dihitung menggunakan persamaan energi total Kohn-Sham, sehingga sistem multi-elektron dapat diselesaikan dengan tingkat akurasi yang diinginkan. Persamaan energi total Kohn-Sham yang dimaksud adalah:

$$E_{total} = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \int \rho(r) V_H(r) dr + E_{xc}[\rho] - \int \rho(r) V_{xc}(r) dr \quad (3)$$

Energi total pada persamaan (3) terdiri dari energi orbital ε_i , koreksi elektrostatik (Hartree), dan kontribusi dari energi pertukaran-korelasi.

Tantangan besar tetap ada dalam penggambaran efek pertukaran dan korelasi antar-elektron, yang merupakan fenomena kuantum murni. Dalam persamaan Kohn-Sham, interaksi antar-elektron digambarkan melalui potensial pertukaran-korelasi $V_{xc}(r)$. Potensial ini mencakup dua kontribusi utama: efek pertukaran (berkaitan dengan prinsip eksklusi Pauli) dan korelasi (mencerminkan gaya tolak-menolak antar elektron). Karena bentuk eksak $V_{xc}(r)$ tidak diketahui, berbagai pendekatan, seperti *local density approximation* (LDA) [Kohn, 1999], *generalized gradient approximation* (GGA) [Perdew *et al.*, 1992], atau *hybrid functionals* [Perdew *et al.*, 1996], digunakan untuk memperkirakan potensial ini.

Pada pendekatan LDA, energi pertukaran-korelasi di setiap titik dalam ruang hanya bergantung pada kerapatan elektron lokal di titik tersebut. LDA menggunakan asumsi bahwa sifat elektron di suatu titik dapat direpresentasikan sepenuhnya oleh kerapatannya, sehingga persamaan untuk energi pertukaran-korelasi $E_{xc}^{LDA}[\rho]$ dapat ditulis sebagai:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) d^3r \quad (4)$$

Pada persamaan (4), $\epsilon_{xc}(\rho(r))$ adalah energi pertukaran-korelasi per satuan volume yang bergantung pada kerapatan elektron lokal. LDA bekerja dengan baik pada sistem dengan kerapatan elektron yang seragam, seperti logam, tetapi kurang akurat untuk sistem dengan kerapatan berubah tajam. GGA tidak hanya mempertimbangkan kerapatan lokal elektron, tetapi juga gradien (perubahan spasial) dari kerapatan tersebut, yang membuatnya lebih akurat untuk menangani sistem di mana kerapatan elektron bervariasi, seperti pada permukaan material atau sistem molekuler. Persamaan untuk energi pertukaran-korelasi dalam GGA adalah:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}(\rho(r), \nabla \rho(r)) d^3r \quad (5)$$

Pada persamaan (5), $\nabla \rho(r)$ adalah gradien kerapatan elektron, yang menambahkan informasi tentang bagaimana kerapatan berubah di sekitar titik tersebut. GGA memberikan deskripsi yang lebih baik untuk ikatan kimia dan interaksi antar-atom dibandingkan dengan LDA, walaupun masih memiliki keterbatasan untuk sistem dengan korelasi elektron yang kuat.

Hybrid functional menggabungkan metode Hartree-Fock (HF) dengan pendekatan DFT lokal atau semi-lokal seperti LDA dan GGA untuk memperkirakan energi pertukaran-korelasi secara lebih akurat. Dalam metode ini, sebagian energi pertukaran dari HF digabungkan dengan energi pertukaran-korelasi yang dihitung menggunakan DFT, sehingga memungkinkan deskripsi interaksi elektron-elektron yang lebih baik, terutama untuk sistem molekul kompleks. Secara umum, persamaan energi pertukaran-korelasi dalam *hybrid functional* adalah:

$$E_{xc}^{hybrid} = aE_x^{HF} + (1 - a)E_x^{DFT} + E_c^{DFT} \quad (6)$$

Pada persamaan (6), a adalah parameter gabungan yang menentukan kontribusi energi pertukaran dari Hartree-Fock (HF) dan DFT, yang biasanya dioptimasi dari data eksperimen. Komponen E_x^{HF} merupakan interaksi elektron secara langsung dengan akurasi tinggi, tetapi memerlukan biaya komputasi besar. Sementara itu, E_x^{DFT} lebih efisien secara komputasi, namun kurang akurat untuk interaksi jarak jauh. Komponen E_c^{DFT} adalah energi korelasi yang mencakup interaksi elektron yang tidak dijelaskan oleh energi pertukaran. Contoh populer

dari *hybrid functional* adalah B3LYP, yang menggabungkan energi pertukaran Hartree-Fock, *Becke's exchange functional* (B88), dan energi korelasi *Lee-Yang-Parr* (LYP), yang disajikan oleh persamaan sebagai berikut [Xu dan Goddard, 2004; Zhang *et al.*, 2010]:

$$E_{xc}^{B3LYP} = (1 - a)E_x^{LDA} + aE_x^{HF} + b\Delta E_x^{B88} + cE_c^{LYP} + (1 - c)E_c^{VWN} \quad (7)$$

Pada persamaan (7), a , b , dan c adalah parameter yang ditentukan berdasarkan perbandingan dengan data eksperimen. E_x^{LDA} adalah energi pertukaran dari pendekatan LDA, ΔE_x^{B88} adalah koreksi gradien dari *Becke's exchange functional* (B88). E_c^{LYP} adalah energi korelasi dari metode Lee-Yang-Parr. E_c^{VWN} adalah energi korelasi dari pendekatan Vosko-Wilk-Nusair (VWN). Setiap komponen ini dirancang untuk meningkatkan akurasi prediksi energi pertukaran-korelasi, terutama untuk sistem molekul kompleks. *Hybrid functional* sangat efektif dalam memperbaiki prediksi energi ikatan, sifat optik, frekuensi vibrasi, dan berbagai properti molekul. Namun memiliki biaya komputasi yang lebih tinggi dibandingkan dengan LDA dan GGA [Arbuznikov dan Kaupp, 2014].

Pemilihan pendekatan fungsional sangat bergantung pada jenis sistem yang akan disimulasikan, serta pada karakteristik material dan kebutuhan komputasi yang relevan. Untuk material dengan struktur elektron yang relatif sederhana atau sistem dengan kerapatan elektron yang tidak bervariasi secara signifikan, pendekatan seperti LDA sering kali cukup memadai, mengingat metode ini memiliki efisiensi komputasi yang tinggi. Namun, untuk sistem yang lebih kompleks, seperti molekul organik, permukaan material, atau material dengan kerapatan elektron yang bervariasi tajam, penggunaan GGA atau bahkan *hybrid functional* dapat memberikan akurasi yang jauh lebih baik, meskipun dengan biaya komputasi yang lebih besar. Selain itu, pemilihan fungsional juga harus memperhitungkan sifat spesifik material. Misalnya, untuk sistem dengan korelasi elektron yang kuat atau material transisi logam, fungsional yang lebih akurat mungkin diperlukan untuk menggambarkan perilaku interaksi elektron-elektron secara tepat. Oleh karena itu, keseimbangan antara akurasi dan efisiensi komputasi sangat penting dalam menentukan metode yang tepat,

dengan mempertimbangkan seberapa penting tingkat presisi hasil simulasi untuk aplikasi yang diinginkan serta keterbatasan sumber daya komputasi yang tersedia.

Bapak, Ibu dan hadirin yang saya hormati,

APLIKASI DFT UNTUK SIMULASI MATERIAL

Simulasi Material 0-Dimensi (0D) dan 1-Dimensi (1D)

Secara geometris, material 0-dimensi (0D) dan 1-dimensi (1D) sebenarnya bersifat 3-dimensi. Namun, istilah 0D digunakan untuk merujuk pada struktur yang sangat kecil, sering kali berukuran nanometer, ketika elektron terperangkap dalam semua arah, sehingga perilakunya menjadi sangat terbatas. Contoh umum material 0D adalah nanopartikel, kluster atom, dan molekul individu. Karena ukurannya yang sangat kecil, efek kuantum memainkan peran penting dalam menentukan sifat-sifat material 0D ini. Nanopartikel adalah partikel berukuran sekitar 1-100 nm yang memiliki sifat unik berbeda dari material *bulk* [Cele, 2020]. DFT telah digunakan untuk menyimulasikan nanopartikel logam seperti emas (Au) dan perak (Ag), ketika sifat optik seperti resonansi plasmon dapat dioptimalkan untuk aplikasi dalam sensor atau katalis [Michos *et al.*, 2024]. Selain itu, DFT juga berperan dalam memahami stabilitas dan struktur kluster atom, yang sering kali menunjukkan sifat kimia berbeda dari atom tunggal atau material *bulk*. Dengan memodelkan kluster dengan berbagai ukuran dan komposisi, DFT dapat membantu menentukan geometri paling stabil serta memprediksi sifat katalitik atau magnetik kluster tersebut. Selain nanopartikel dan kluster atom, DFT juga digunakan untuk mempelajari sistem molekuler, terutama dalam memahami distribusi elektron dan energi ikat dalam molekul. Metode ini memungkinkan perhitungan presisi tinggi terhadap energi ikat, frekuensi vibrasi, serta potensi reaksi kimia molekul. Pendekatan ini sangat penting dalam fisika-kimia kuantum dan farmasi, di mana pemahaman interaksi antar molekul pada tingkat kuantum dapat mengarahkan pada pengembangan obat baru.

Jika pada material 0 dimensi (0D) elektron terkungkung ke segala arah dalam ruang yang sangat kecil, pada material 1 dimensi

(1D) elektron bergerak terbatas dalam satu dimensi, sementara dua dimensi lainnya sangat terbatas. Material 1D mencakup nanowire, nanotube, dan pita nano, yang memiliki sifat unik karena keterbatasan dimensi. Nanowire dan nanotube adalah contoh umum material 1D yang banyak digunakan dalam elektronik dan fotonik. Misalnya, *carbon nanotube* (CNT) memiliki sifat elektronik unik karena strukturnya yang berbentuk tabung kecil dan kuat. DFT memungkinkan perhitungan sifat mekanik nanowire dan nanotube, seperti modulus elastisitas, kekuatan tarik, dan perilaku termal yang memiliki peran penting dalam perangkat nano seperti sensor atau aktuator [Srivastava *et al.*, 2008]. Selain itu, pita nanometer, seperti *graphene nanoribbon* (GNR), adalah material 1D yang menarik perhatian dalam beberapa tahun terakhir. GNR Adalah potongan tipis dari graphene yang memiliki sifat elektronik berbeda tergantung pada tepi dan lebarnya. DFT digunakan untuk mempelajari efek tepi dan rekonstruksi atom di tepi GNR, yang dapat mempengaruhi sifat semikonduktornya, penting dalam pengembangan transistor skala nano dan perangkat elektronik lainnya [Houtsma *et al.*, 2021; Luo *et al.*, 2021].

Untuk aplikasi molekuler, grup riset kami melakukan penelitian terkait penggunaan *fullerene* dalam aplikasi pengiriman obat (*drug delivery*). Apriati *et al.* (2022) menganalisis interaksi antara molekul kecil (H_2 , H_2O , NH_3 , O_2 , dan O_3) dan *fullerene* (C_{60}). Penelitian ini menyoroti potensi C_{60} sebagai sistem transportasi obat karena kemampuannya untuk menstabilkan molekul di dalamnya serta membentuk ikatan dengan molekul di luar. Penelitian selanjutnya memahami interaksi *fulleren* yang di doping silikon (Si) dengan molekul obat seperti *paracetamol* dan *hydroxiurea*. Hasilnya menunjukkan bahwa *fullerene* yang didoping Si memiliki energi adsorpsi lebih negatif, menandakan bahwa molekul obat dapat diadsorpsi secara kimia. Hal ini menunjukkan potensi aplikasi *fulleren* dalam pengiriman obat di masa depan. Sari *et al.* (2024) juga melaporkan studi komputasi menggunakan DFT untuk mengevaluasi stabilitas energi sistem yang terdiri dari molekul basa nukleat DNA/RNA pada C_{60} yang didoping silikon. Penelitian ini memberikan informasi fisis untuk pengembangan strategi pengiriman gen yang efisien serta aplikasinya dalam terapi gen dan *nanomedicine*.

Simulasi Material 2-Dimensi (2D)

Material 2-dimensi (2D) adalah struktur material monolayer yang memiliki ketebalan sangat tipis bahkan satu lapisan atom, seperti *graphene*, *silicene*, *germanene*, *boron nitride*, dan *transition metal dichalcogenides* (TMDs), yang memiliki sifat elektronik, mekanik, dan optik yang sangat berbeda dari material *bulk*. *Graphene*, terdiri dari satu lapisan atom karbon yang tersusun dalam kisi heksagonal, adalah salah satu material 2D yang paling banyak dipelajari. DFT telah menjadi alat penting dalam memahami sifat elektronik *graphene*, termasuk konduktivitas listrik yang sangat tinggi dan efek kuantum yang muncul pada skala atom, serta mempelajari interaksi antara *graphene* dengan substrat atau molekul lain untuk aplikasi dalam sensor atau perangkat elektronik. DFT digunakan untuk prediksi sifat elektronik, mekanik, dan optik TMDs, serta perubahan sifat-sifat ini ketika material diregangkan, dikompresi, atau ditumpuk dengan lapisan material 2D lainnya [Mueller dan Malic, 2018]. *Hexagonal boron nitride* (h-BN) adalah material 2D yang menyerupai *graphene* tetapi bersifat insulator atau *wide-bandgap semiconductor* [Amalia *et al.*, 2018; Sholihun *et al.*, 2019]. DFT memungkinkan prediksi akurat tentang kekuatan ikatan, sifat optik, serta interaksi h-BN dengan material 2D lainnya, membuka jalan untuk aplikasi dalam elektronik terintegrasi, di mana h-BN dapat digunakan sebagai bahan dielektrik atau substrat [Moon *et al.*, 2022; Yang *et al.*, 2017; Strand, *et al.*, 2019]. Untuk penelitian terkait komputasi material 2D ini, kami telah melakukan berbagai kajian. Umam *et al.* (2018) mengkaji efek regangan *biaxial* pada *silicene* dan menemukan bahwa struktur terlipat lebih stabil dibandingkan struktur planar. *Silicene* tetap stabil hingga regangan 12%, yang menunjukkan potensinya dalam aplikasi seperti transistor efek medan *tunneling*. Wardah *et al.* (2018) meneliti sifat struktural dan elektronik dari *defect vacancy* atom pada h-BN dengan memodelkan lima konfigurasi *defect*. Penelitian ini juga menjelaskan bahwa *vacancy* atom mempengaruhi struktur elektronik h-BN, *monovacancy* menghasilkan keadaan (*states*) terlokalisasi di dekat level Fermi, sedangkan *divacancy* menghasilkan dua *states* baru di sekitar level Fermi.

Dian *et al.* (2019) studi mengenai stabilitas *germanene* melalui perlakuan *defect* berupa *vacancy*. Penelitian yang dilakukan dapat

memberikan informasi fisis untuk kemungkinan pengembangan perangkat elektronik berbasis germanium, khususnya dalam mengontrol *defect* selama proses fabrikasi. Stabilitas *multivacancy* dalam lapisan tunggal h-BN juga diteliti yang mengusulkan *magic number* (pola kestabilan) dalam *multivacancy* h-BN mengikuti pola $4m+2$ (Sholihun *et al.* 2019). Hasil ini sesuai dengan model DBCM (*dangling bond counting model*). Zakiah *et al.* (2021) menyelidiki adsorpsi hidrogen dan air pada monolayer h-BN. Studi ini menekankan potensi h-BN sebagai material aktif dalam perangkat elektronik, terutama untuk penyimpanan hidrogen. Dian *et al.* (2020) kembali meneliti stabilitas dan geometri atomik *multivacancy* germanene. Penelitian ini memberikan informasi tentang energi formasi dan disosiasi yang dapat membantu memahami stabilitas *multivacancy* germanene. Rifqi *et al.* (2021) menyelidiki proses adsorpsi merkuri metil (MeHg) pada *germanene* dalam lingkungan berair. Penelitian ini penting untuk pengembangan teknik remediasi pencemaran MeHg di lingkungan perairan. Hidayati *et al.* (2022) melakukan penelitian tentang struktur elektronik *bilayer graphene* yang disisipkan dengan kalsium (Ca), menguji dua konfigurasi: kalsium di tengah bilayer (M-site) dan di atas permukaan bilayer (T-site). Penelitian ini menunjukkan bahwa energi adsorpsi negatif menunjukkan reaksi eksotermik dan transfer elektron yang terjadi dari P3HT ke *graphene*, yang berpotensi meningkatkan efisiensi sel surya organik (Fia Amalia *et al.*, 2024).

Penelitian lebih lanjut mengkaji peningkatan kinerja termoelektrik *graphene* yang di doping atom nitrogen (N) menunjukkan bahwa *graphene* yang di doping atom N memiliki potensi besar untuk aplikasi termoelektrik (Rositawati *et al.*, 2023). Di sisi lain, dilakukan analisis terhadap sifat termolistrik dari monolayer dan bilayer *buckled XTe* (X = Ge, Sn, dan Pb) menggunakan persamaan transport Boltzmann. Penelitian ini menyoroti pentingnya pengurangan dimensi material untuk meningkatkan kinerja termolistrik (Lubis *et al.*, 2022).

Simulasi Material 3-Dimensi (3D)

Material 3-dimensi (3D) adalah material dengan atom tersusun dalam tiga dimensi ruang, mencakup logam, semikonduktor, dan polimer. DFT telah digunakan secara luas untuk mempelajari sifat-sifat

material 3D ini [Layegh *et al.*, 2024; Goyal *et al.*, 2022]. Untuk logam, DFT membantu memprediksi sifat elektronik dan mekanik, seperti struktur pita energi, densitas keadaan, dan modulus elastisitas, yang penting untuk memahami perilaku logam di bawah tekanan tinggi atau lingkungan korosif, serta untuk mengembangkan paduan dengan sifat yang diinginkan [Taylor dan Ke, 2021]. Dalam kasus semikonduktor seperti silikon (Si) dan germanium (Ge), DFT digunakan untuk menganalisis sifat elektronik, seperti celah pita energi dan mobilitas elektron, yang krusial untuk desain transistor dan dioda, serta untuk memahami efek doping dalam pengembangan perangkat elektronik.

Kami juga melakukan penelitian material 3D seperti silikon, germanium, intan, timah, dan SiC. Dengan model supersel yang terdiri dari 64-1000 atom. Diantara material yang disimulasikan adalah SiC dengan doping Ag dan Sr yang menghasilkan kesimpulan bahwa konfigurasi substitusi Ag dan Sr lebih stabil dibandingkan dengan konfigurasi interstisial. Dari perhitungan energi formasi *defect* untuk Ag dan Sr pada situs substitusi menunjukkan bahwa Ag dan Sr lebih mudah terperangkap pada situs substitusi, dengan Ag lebih stabil dibandingkan Sr, dan memiliki aplikasi dalam bahan bakar nuklir TRISO (*TR*Istructural-*IS*Otropic) [Sholihun *et al.*, 2023]. Penelitian lain dalam material semikonduktor, misalnya silikon dengan supersel besar hingga 1728 atom yang menunjukkan pentingnya mempertimbangkan efek vibrasi dalam perhitungan konsentrasi *vacancy* untuk hasil yang lebih akurat [Sholihun *et al.*, 2015; Sholihun *et al.*, 2016]. Kajian mengenai kestabilan material dalam germanium menunjukkan bahwa konfigurasi *fourfold* adalah yang paling stabil, mirip dengan silikon. Penelitian ini menyoroti perbedaan signifikan antara pembentukan *vacancy* pada germanium dan silikon. Informasi terkait *vacancy* ini diperlukan terkait kontrol *defect* yang merupakan aspek penting dalam fabrikasi material semikonduktor. Penelitian pada material semikonduktor lain yaitu intan (*wide band gap semiconductor*) dengan *doping* nitrogen menunjukkan bahwa *defect* nitrogen dalam konfigurasi substitusional lebih stabil dibandingkan dengan interstisial. Selama proses optimasi, distorsi geometri terjadi dengan relaksasi atomik yang signifikan [Sholihun *et al.*, 2018]. Pengaruh vibrasi dan *defect* (*vacancy* dan hidrogen) terhadap struktur elektronik intan juga

diteliti oleh Fatomi *et al.* (2022), Purnawati *et al.* (2023), dan Fajariah *et al.* (2024).

Bapak, Ibu dan hadirin yang saya hormati,

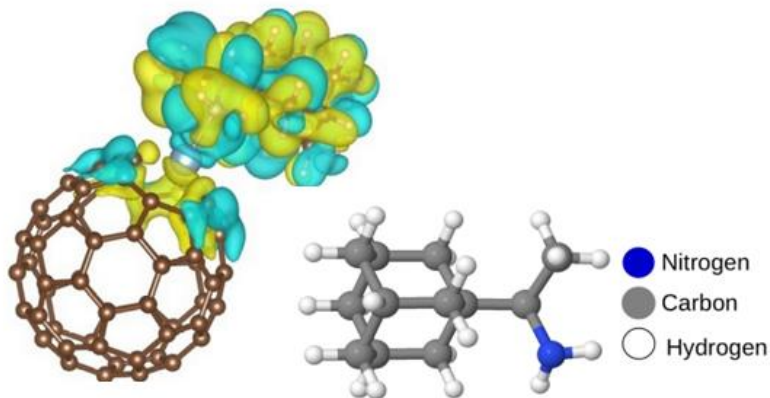
APLIKASI DFT PADA TEKNOLOGI TERKINI DAN PENEMUAN MATERIAL BARU

DFT memungkinkan untuk memodelkan sifat elektronik dan struktur atom material, yang pada gilirannya membantu dalam pengembangan berbagai teknologi mutakhir. Pada pembahasan ini, akan dijelaskan bagaimana DFT diaplikasikan dalam berbagai bidang, termasuk teknologi kuantum, penghantaran obat, dan penemuan material baru.

Kemajuan teknologi kuantum generasi mendatang bergantung pada kemampuan untuk menghasilkan, mengontrol, dan mendeteksi keadaan kuantum dalam materi. *Defect* titik dalam benda padat dapat dimanfaatkan sebagai sumber foton tunggal, qubit untuk pengolahan informasi kuantum, serta sensor berskala nano yang berpotensi merevolusi teknologi informasi, penelitian biologis, dan terapi medis. Salah satu platform penting dalam pengembangan teknologi kuantum adalah nitrogen-vacancy dalam intan [Doherty *et al.*, 2013; Sholihun *et al.*, 2018; Fatomi *et al.*, 2022; Purnawati *et al.*, 2023]. Material ini memiliki koherensi kuantum yang tahan lama pada suhu kamar dan kondisi lingkungan normal, menjadikannya kandidat material aktif dalam komponen teknologi kuantum. Selain intan, upaya yang sedang dilakukan untuk mengembangkan *defect* titik lainnya, termasuk pemancar foton tunggal dalam bahan seperti silikon karbida (SiC), silikon (Si), boron nitrida heksagonal dua dimensi (h-BN), serta ion tanah jarang dalam berbagai padatan [Bathen dan Vines, 2021; Zhang *et al.*, 2020; Castelletto *et al.*, 2020]. Salah satu tantangan besar dalam pengembangan teknologi ini adalah memastikan kemurnian material dan proses fabrikasi yang memadai untuk aplikasi kuantum. Dalam konteks ini, simulasi berbasis DFT efektif dalam memahami fisika yang mendasari sistem atomik.

DFT dan *molecular dynamics* (MD) juga memainkan peran penting dalam penelitian *molecular machine* (mesin molekuler) seperti *drug delivery* (penghantaran obat). Simulasi penghantaran obat

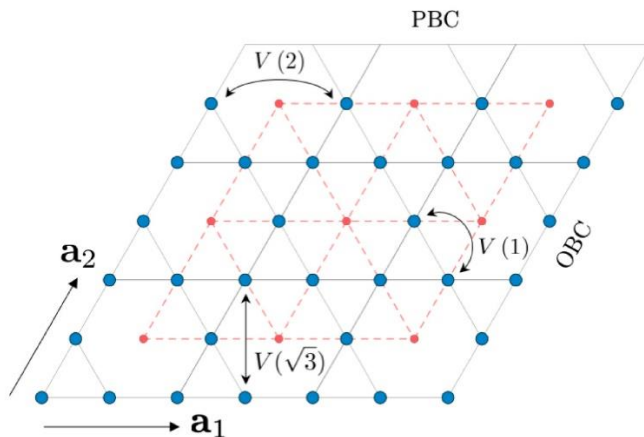
berfokus pada pemahaman interaksi molekuler dan sifat elektronik antara obat dan pembawa, seperti nanopartikel dan polimer. DFT memungkinkan memprediksi stabilitas, reaktivitas, dan pelepasan obat dalam sistem penghantaran, yang diperlukan untuk merancang metode penghantaran yang lebih efektif dan terarah. DFT telah digunakan untuk memodelkan interaksi obat dengan nanopartikel emas dan polimer. Simulasi ini juga membantu mempelajari interaksi obat dengan protein target, yang berkontribusi pada terapi yang lebih selektif serta mengurangi efek samping [Kroto *et al.*, 1985; Georgakilas *et al.*, 2002; Lin *et al.*, 2015; Ye *et al.*, 2021; Kumar and Raza, 2018]. Diantara penelitian kami pada bidang ini adalah simulasi untuk mengetahui interaksi molekul uji seperti *nucleobase* [Sari *et al.*, 2024], *paracetamol*, *hydroxyurea* [Apriati *et al.*, 2023], dan *rimantadine* dengan *heterofullerene* [Kristiawan *et al.*, 2024]. Kristiawan *et al.* (2024) menyelidiki interaksi molekul obat *rimantadine* (RMT) dengan *heterofullerene* sebagai nanomaterial (Gambar 2). Energi adsorpsi dan transfer muatan dianalisis untuk menyelidiki interaksi antara RMT dan *heterofullerene*. Penambahan dopan N pada *heterofullerene* C59Al meningkatkan energi adsorpsi, yang memungkinkan transportasi tiga molekul obat RMT. Penelitian ini memiliki signifikansi dalam aplikasi *drug delivery* karena menunjukkan potensi peningkatan kapasitas transportasi obat, yang membuka peluang untuk pengembangan sistem penghantaran obat yang lebih efisien, dan dapat meningkatkan efektivitas terapi dengan memfasilitasi pengangkutan molekul obat ke target.



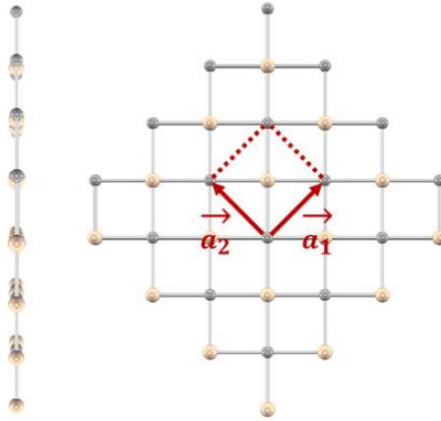
Gambar 2. Interaksi antara *heterofullerene* dan molekul obat *rimantadine*.

DFT juga berkontribusi dalam penemuan material baru yang penting dalam berbagai aplikasi teknologi. Misalnya, Boron Nitride memiliki struktur mirip graphene tetapi terdiri dari boron dan nitrogen, yang dikenal karena sifat isolatnya. MoS₂ adalah semikonduktor yang banyak digunakan dalam elektronik, optik, dan katalisis. *Black Phosphorus* memiliki *band gap* yang dapat disesuaikan, yang membuatnya cocok digunakan dalam berbagai aplikasi semikonduktor. Selain itu, ada juga material-material seperti *transition metal dichalcogenides*, *Stanene*, *Silicene*, *Germanene*, *Phosphorene*, *Antimonene*, dan MXenes, yang masing-masing memiliki sifat unik dan potensi aplikasi yang luas dalam elektronik, optik, penyimpanan energi, dan banyak bidang lainnya. Dalam perkembangannya, penelitian terhadap material 2-D atau lapisan tipis dengan struktur selain *honeycomb* semakin meningkat, seperti struktur *kagome* dan *square*. Material dengan struktur *kagome* (Gambar 3) yang sedang diteliti adalah $XmYn$ ($m:n = 3:1$ atau $2:1$ atau $1:1$) dengan $X = \text{Fe, Mn, Co}$ dan $Y = \text{Sn, Ge}$ [Samaidar *et al.*, 2021; Liu *et al.*, 2020; Kang *et al.*, 2020; Teng *et al.*, 2023]. Teng *et al.* (2023) menggunakan spektroskopi fotoemisi resolusi tinggi, hamburan neutron inelastik, dan DFT untuk mengamati tanda-tanda elektronik dari kisi *kagome* dalam FeGe. Penelitian ini menemukan bahwa interaksi magnetik dapat

memodifikasi pita elektronik, yang mengakibatkan pembentukan *charge density wave* (gelombang kerapatan muatan). Temuan ini menekankan hubungan yang erat antara magnetisme dan pengaturan muatan dalam logam kagome yang memiliki korelasi elektron yang sedang. Logam berstruktur kagome seperti CoSn, yang memiliki fermion Dirac selektif orbital dan pita datar, berpotensi dimanfaatkan dalam teknologi komputasi kuantum dan spintronik. Dengan sifat topologi dan interaksi spin-orbit, material ini dapat mendukung transportasi muatan yang efisien dan stabilitas kuantum, sehingga dapat digunakan dalam perangkat topologi seperti sensor dan detector [Liu *et al.*, 2020].



Gambar 3. Material dengan struktur Kagome [Teng *et al.* Nat. Phys. 19 (2023) 814–822].



Gambar 4. Material dengan struktur *square*
[Sholihun *et al.* Phys. Scr. 98 (2023) 115903].

Hoang *et al.* (2020) mengeksplorasi stabilitas, struktur elektronik, dan sifat magnetik dari material dua dimensi (2-D) FeC dengan struktur kisi persegi (t-FeC) dan segitiga (tr-FeC). Hasilnya menunjukkan bahwa struktur kisi segitiga lebih stabil dibandingkan dengan struktur *square*. Kedua bentuk FeC 2-D ini bersifat logam dan feromagnetik, namun momen magnetik atom rata-rata Fe pada struktur kisi segitiga secara signifikan lebih kecil dibandingkan dengan struktur kisi persegi. Penelitian ini juga menyimpulkan bahwa struktur *square* dapat terbentuk secara alami, sementara struktur kisi segitiga tidak, yang memberikan informasi penting untuk aplikasi masa depan material ini. Material baru diatomik dengan struktur *square* untuk unsur-unsur Golongan IV (Gambar 4) telah diteliti [Sholihun *et al.* 2023]. Penelitian ini menyelidiki enam material diatomik dua dimensi (2D) dengan struktur persegi, yaitu SiC, GeC, SnC, SiGe, SnGe, dan SnSi, untuk menilai stabilitas struktural dan sifat elektroniknya. Hasil penelitian menunjukkan bahwa material dengan struktur persegi SnGe dan SnSi sangat stabil dan memiliki sifat elektronik yang dapat dimanipulasi dengan perlakuan khusus seperti penambahan *doping defect* sehingga berpotensi untuk aplikasi dalam perangkat elektronik semikonduktor di masa depan.

Kolaborasi lintas disiplin dalam penggunaan metode seperti perpaduan antara DFT (menghitung sifat elektronik), MD (memodelkan dinamika atom), dan *machine learning* (mempercepat prediksi berdasarkan pola data) diperlukan untuk mencapai simulasi yang akurat dan efisien dalam desain material atau molekular. Dengan menggabungkan metode ini, riset di bidang teknologi masa depan seperti *molecular machines* dapat dilakukan lebih cepat. Kolaborasi dengan eksperimentalis juga diperlukan untuk menguji, memvalidasi, dan mempercepat penerapan teknologi riil secara efisien.

Pimpinan sidang, Bapak, Ibu dan hadirin yang saya hormati,

Pada akhir pidato ini, ijin saya untuk menyampaikan apresiasi dan terima kasih kepada semua pihak yang telah mewarnai perjalanan akademik saya sampai hari ini.

Saya ingin menyampaikan terima kasih dan penghargaan kepada institusi, para guru, kolega, teman-teman, dan keluarga yang telah mendukung perjalanan akademik saya. Saya juga berterima kasih kepada Pemerintah Republik Indonesia, khususnya Kementerian Pendidikan, Kebudayaan, Riset, dan Teknologi, atas kepercayaan yang diberikan kepada saya untuk menjabat sebagai Guru Besar di bidang Desain Komputasi Kristal dan Molekuler. Selain itu, saya menyampaikan terima kasih kepada Pimpinan Universitas, Senat Akademik, Dewan Guru Besar, dan Tim Penilai Angka Kredit (PAK) tingkat Fakultas dan Universitas, serta kepada Pimpinan Fakultas MIPA UGM, Pimpinan dan Anggota Senat Fakultas MIPA UGM, Pimpinan Departemen Fisika, Ketua dan Sekretaris Program Studi di Fakultas MIPA UGM.

Penghormatan dan apresiasi saya sampaikan kepada Prof. Dr. Pekik Nurwantoro (Pembimbing Skripsi dan Tesis), Prof. Dr.Eng. Kuwat Triyana (Pembimbing 2 Tesis), Prof. Dr. Agung Bambang Setio Utomo, dan Prof. Dr. Arief Hermanto atas dukungan, arahan, dan ilmu yang telah diberikan. Saya merasa bersyukur menjadi bagian dari Universitas Gadjah Mada, khususnya di Departemen Fisika, yang memberi saya kesempatan untuk belajar dan berkembang bersama para akademisi: Prof. Dr. Mitrayana, Prof. Dr. Gede Bayu Suparta, Prof. Dr. Harsojo, Prof. Dr. Sismanto, Prof. Dr. Yusril Yusuf, Prof. Dr.Eng. Edi

Suharyadi, S.Si., M.Si., M.Eng, juga kepada guru-guru kami: Prof. Dr. Muslim (alm.) dan Drs. Zahara Muslim, M.Sc., Prof. Dr. Kusminarto (alm.), Prof. Dr. Kamsul Abraha (alm.), Prof. Dr. Karyono (alm.), Prof. Dr. Kirbani Sri Brotopuspito (alm.).

Selanjutnya, terima kasih kepada: Dr. Moh. Ali Joko Wasono, Dr.rer.nat. Muhammad Farchani Rosyid, Dr. Mirza Satriawan, Dr. Eng. Rinto Anugraha, Dr. Bambang Murdaka, Drs. Sunarta, MS, Dr. Eko Sulistya, Dr. Dwi Satya Palupi, Dr. Yosef Robertus Utomo, Dr. Guntur Maruto, Drs. Wagini, M.S., Dr. Iman Santoso, Dr.Eng. Fahrudin Nugroho, Romy Hanang Setya Budhi, Ph.D., Ikhsan Setiawan, S.Si., M.Si., Dra. Eko Tri Sulistyani, M.Sc., Elida Lailiya Istiqomah, S.Si., M.Sc., Muhamad Darwis Umar, Ph.D., Moh. Adhib Ulil Absor, Ph.D., Dr. Chotimah, Dr.Eng. Ahmad Kusumaatmaja, Dr. Juliasih Partini, Ari Dwi Nugraheni, Muhammad Arifin, M.Sc., Ph.D., Dr. Wahyudi, Dr.rer.nat. Wiwit Suryanto, Dr. Ing. Ari Setiawan (alm.), Dr. Suparwoto, Drs. Imam Suyanto, M.Si., Dr. Budi Eka Nurcahya, Dr.rer.nat. Ade Anggraini, Dr. Sudarmaji, Dr.rer.nat. Mochamad Nukman, Dr. Eddy Hartantyo, Dr. rer. nat. Herlan Darmawan, Dr.Sc., Dr. Afif Rakhman, Idham Syah Alam, Ph.D., Dr. Theodosius Marwan Irnaka, Dr.rer.nat. Sintia Windhi Niasari, Dr. Chalis Setyadi, Devy Pramudyah Wardani, S.Si., M.Sc., Ibnu Jihad, S.Si., M.Sc., dan Adam Sukma Putra, S.Si., M.Si. Saya juga mengucapkan terima kasih kepada para staf kependidikan di lingkungan FMIPA, khususnya di Departemen Fisika, serta menyampaikan penghargaan kepada rekan-rekan di Urusan Kepegawaian Fakultas MIPA dan Universitas.

Kemudian, penghormatan juga saya sampaikan kepada *supervisor* saya saat studi program doktor Prof. Mineo SAITO atas bimbingan dan ilmu baru yang diberikan, dan juga kepada Prof. Fumiyuki ISHII sebagai *co-supervisor*. Ucapan terima kasih sampaikan kepada teman-teman seperjuangan saat studi program doktor: Dr. Patricia Lubis, Dr. Jianbo LIN, Dr. Muhammad Shafiul Alam, Moh. Adhib Ulil Absor, Ph.D., Romy Hanang Setya Budhi, Ph.D., Dr. Faizal Makhrus, drg. Mayu Winnie Rahmawati, Ph.D., Dr. Trisianto, Dr. Ria Wierma Putri, Prof. Dr. Firzan Nainu, Prof. dr. Hamidie Ronald Daniel Ray, PhD., Dr. Muhammad Navis Rofii, dan teman-teman yang lain

atas segala bantuan, dukungan, dan diskusinya selama studi program doktor di Kanazawa University (Jepang).

Saya juga ingin menyampaikan apresiasi dan terima kasih kepada para asisten/mahasiswa bimbingan saya yang masih aktif: Nurul Fajariah, Malika Fadllyana, Cristina Wulan Oktavina, Alfiorell Ababil, Putri Awalia Shabrina, Achmad Naufal Rahadi, Nurhidayah, Ummy Kaltsum, Wa Ode Sitti Ilmawati, Rohima Wahyu Ningrum, Fachrizal Rian Pratama, dan Andreas Christian Louk. Terima kasih juga saya ucapkan kepada asisten/bimbingan yang telah menjadi alumni, yang sekarang menjadi kolega dan bagian dari tim riset: Harmon Prayogi, M.Sc. (Universitas Negeri Surabaya), Bambang Kristiawan (Universitas Kristen Teknologi Solo), Dr. Dian Putri Hastuti (peneliti di National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Jepang), Dr. Hana Pratiwi Kadarisman (*Assistant Professor* di Kanazawa University, Jepang), Dr. Wardah Amalia (National Institute for Materials Science, Jepang), Yosephine Novita Apriati, M.Sc., Zohan Syah Fatomi, M.Sc., Dr. Roni Muslim, Dr. Ravidho Ramadhan (Kyoto University), Fia Amalia, M.Sc., Nur Anggita Sari, S.Si., dan yang lain. Terima kasih juga saya sampaikan kepada kolega: Dr.rer.nat. Isom Hilmi (UAD), Budi Prabowo Soewondo, M.Sc. (UNISBA), Dr. Asih Melati (UIN Sunan Kalijaga), Wilson Lisan, M.Sc. (EFISON Lisan Teknologi), Dr. Diki Purnawati (BRIN), dan Dr. Sasfan Arman Wella (BRIN) serta kolega-kolega lain yang tidak dapat saya sebut satu per satu, terima kasih atas kerja samanya selama ini.

Saya ingin menyampaikan terima kasih kepada Prof. Dr. Mirwan Ushada (Direktur Direktorat Penelitian UGM) dan Prof. Dr. drg. Diatri Nari Ratih (Sekretaris Direktorat Penelitian UGM) atas kesempatan yang diberikan melalui Satuan Tugas (Satgas) dengan tim yang sangat produktif dari berbagai klaster: Dr. Mutiah Amini (FIB), Dr. Widiastuti Setyaningsih (FTP), Prof. Dr. dr. Eti Nurwening Sholikhah (FK-KMK), dan Dr. Atrida Hadiani (FT). Terima kasih untuk kekompakan dan kerja samanya yang produktif.

Terima kasih juga saya sampaikan kepada Prof. Dr.rer.nat. Harno Dwi Pranowo dan Prof. Dr.Eng. Edi Suharyadi, S.Si., M.Si., M.Eng yang telah berkenan mereviu dan memberi masukan pada naskah pidato pengukuhan ini.

Penghormatan dan ta'dhim saya sampaikan kepada pimpinan dan para ustadz/pengajar Pondok Pesantren Raudlatul Ulum (Guyangan, Pati) atas bekal ilmu yang saya peroleh selama 6 tahun sekolah di Madrasah Tsanawiyah dan Aliyah Raudlatul Ulum. Juga kepada guru-guru saya di Madrasah Darul Ulum dan di SDN Sambilawang serta semua guru/ustadz yang pernah mengajari saya ilmu baik melalui pendidikan formal maupun non-formal, yang tidak dapat saya sebut satu per satu, terima kasih untuk semua ilmu, doa, dan restu.

Saya ucapkan terima kasih dan doa saya panjatkan kepada Allah Swt untuk kedua orang tua saya: Bapak Rasdi (alm.) dan Ibu Paringsih yang dengan kasih sayang dan kesabarannya merawat saya dari kecil, terlebih saat sakit, di saat putramu tidak punya semangat bahkan takut menatap masa depan. Terima kasih untuk semua pengorbanan, nasihat, dan segala doa yang dilantunkan sehingga saya sampai pada titik ini. Kemudian, kepada Bapak (mertua) Prof. Dr. Ir. Wahyu Widodo dan Ibu (mertua) Prof. Dr. Trisakti Handayani, terima kasih atas kepercayaan, dukungan, semangat, dan doa yang telah diberikan.

Ucapan terima kasih juga saya sampaikan kepada kakak dan adik-adik saya: Riyanto, S.Kom (kakak, beserta keluarga), Sugiharti, S.Si. (adik), dan Sudiro, ST., M.Eng. (adik) atas kebersamaan, bantuan, dan doa selama ini. Juga kepada adik-adik (ipar): Yuan Ekananda Muhammad Adikara, M.SEI. (beserta keluarga) dan drh. Yuanara Augusta Rahmat Adikara, M.Sc. atas semangat dan doanya. Semoga kita semua diberikan kesuksesan dan keberkahan.

Akhirnya, apresiasi, terima kasih, dan cinta kasih saya sampaikan kepada istri saya tercinta dan empat putra-putri saya tersayang. Untuk istri saya Titan Parasita Siradj, S.Si., M.Sc., terima kasih selalu menemani di saat suka dan duka, dan atas curahan perhatian dan waktunya untuk saya dan putra-putri kita. Tidak berlebihan jika orang mengatakan bahwa di balik suami yang sukses ada seorang istri hebat. Walaupun jabatan guru besar ini secara lahir dinisbatkan untuk saya, namun hakikatnya jabatan guru besar ini juga untuk istri saya, karena saya tidak akan dapat meniti karir sebagai dosen dengan tenang dan sempat mengurus kepangkatan sampai ke guru besar jika ada masalah dalam keluarga. Untuk putra-putri saya Naila Atsmar Al Fikriyya (ke-1), Najma Manar Alfadh (ke-2), Ajmal Al Afkar (ke-3), dan Afnan

Syarof Al Kaf (ke-4), terima kasih telah menjadi putra-putri Papa-Mama yang baik, kebersamai dan membuat keluarga kita menjadi ramai dan menyenangkan. Papa dan Mama mendoakan kalian menjadi manusia yang dapat memberikan manfaat kepada orang lain, menjadi pribadi yang sholeh dan sholihah, selalu sehat, dan memperoleh kesuksesan serta keberkahan dari Allah Swt, Aamiin.

Pimpinan sidang, Bapak, Ibu, serta hadirin yang saya hormati,

Saya akhiri pidato ini dengan mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada hadirin yang telah meluangkan waktu untuk hadir dan dengan penuh kesabaran mengikuti pidato ini. Saya mohon maaf jika dalam penyampaian ada kekurangan atau kesalahan. Dengan penuh hormat, saya juga memohon doa restu dari hadirin sekalian agar saya senantiasa diberikan kemudahan dan kemampuan dalam menjalankan tugas dan tanggung jawab sebagai Guru Besar di Departemen Fisika Universitas Gadjah Mada. Saya juga mohon maaf kepada Bapak/Ibu kolega, teman, dan sanak-saudara yang tidak dapat saya sebut satu per satu. Semoga Allah Swt selalu memberikan kesehatan, keberkahan, rahmat dan hidayah kepada kita semua. *Aamiin ya Robbal 'Alamiin.*

*Akhirul kalam, Wallahul Muwaffiq Ilaa Aqwamith Thoriiq,
Tsummassalamu'alaikum Warahmatullahi Wabarakatuh.*

DAFTAR PUSTAKA

- Alipour, M. dan Badooei, Z. (2018). "Toward Electron Correlation and Electronic Properties from the Perspective of Information Functional Theory". *J. Phys. Chem. A* 2018, 122, 31, 6424–6437. DOI: 10.1021/acs.jpca.8b05703
- Amalia F, Nugraheni AD, **Sholihun S.** (2024). "First-principles study on structural and electronic properties of P3HT-graphene". *Journal of Metals, Materials and Minerals*. 34 1833. DOI: 10.55713/jmmm.v34i1.1833
- Amalia W, Nurwantoro P and **Sholihun.** (2019). "Density-functional-theory calculations of structural and electronic properties of vacancies in monolayer hexagonal boron nitride (h-BN)". *Computational Condensed Matter*. 18 e00354. DOI: 10.1016/j.cocom.2018.e00354
- Apriati, Y.N., Kristiawan, B., Jannah, N., Nugraheni, A.D., and **Sholihun.** (2023). "Drug-Molecule Adsorption onto Silicon-Doped Fullerene: A Density Functional Theory Study". *Indones. J. Chem.*, 23, 6, 1742 - 1749. DOI: 10.22146/ijc.84174
- Apriati, Y.N., Nugraheni, A.D., dan **Sholihun.** (2022). "Interaction of C60 with Small Molecules: Adsorption-Inclusion Energy Calculation Using the Density Functional Theory", *Materials Science Forum*, 1066, 135-143. DOI:[10.4028/p-ea93gt](https://doi.org/10.4028/p-ea93gt)
- Arbuznikov, A.V. dan Kaupp, M. (2014). "Towards improved local hybrid functionals by calibration of exchange-energy densities". *J. Chem. Phys.* 141, 204101. DOI:[10.1063/1.4901238](https://doi.org/10.1063/1.4901238)
- Bathen, M.E. dan Vines, L. (2021). "Manipulating Single-Photon Emission from Point Defects in Diamond and Silicon Carbide". *Adv. Quantum Technol.*, 4, 2100003. DOI: 10.1002/qute.202100003
- Beran, G.J.O. (2016). "Modeling Polymorphic Molecular Crystals with Electronic Structure Theory". *Chem. Rev.*, 116, 5567–5613. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00648
- Castelletto, S., Inam, F., Sato, S., dan Boretti, A. (2020). "Hexagonal boron nitride: a review of the emerging material platform for

- single-photon sources and the spin–photon interface”. *Beilstein J. Nanotechnol.*, 11, 740–769. DOI:[10.3762/bjnano.11.61](https://doi.org/10.3762/bjnano.11.61)
- Cele, T. (2020). “Engineered nanomaterials-health and safety”. *IntechOpen*, London, UK. DOI:[10.5772/intechopen.90771](https://doi.org/10.5772/intechopen.90771)
- Doherty, M.W., Manson, N.B., Delaney, P., Jelezko, F., Wrachtrupe, J., Hollenberg, L.C.L. (2013). “The nitrogen-vacancy colour centre in diamond”, *Physics Reports*, 528, 1–45. DOI: [10.1016/j.physrep.2013.02.001](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2013.02.001)
- Fajariah N, Fadllyana M, Purnawati D, Prayogi H, Nugraheni AD, and **Sholihun S.** (2024). “Structural, Energetic, and Electronic Properties of H-Interstitial in C-Monovacancy: A First-Principles Density Functional Theory”. *Trends in Science*. 21 7657. DOI:[10.48048/tis.2024.7657](https://doi.org/10.48048/tis.2024.7657)
- Fatomi, Z.S., Nugraheni, A.D., dan **Sholihun.** (2022). “Vibrational effect on vacancy concentration in diamond: The density-functional-theory calculation”. *Computational Condensed Matter*, 32, e00708. DOI: [10.1016/j.cocom.2022.e00708](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2022.e00708)
- Fatomi, Z.S., Nugraheni, A.D., dan **Sholihun.** (2023). “Atomic Vibrational Effect on Vacancy Concentration of Gray Tin (α -Sn): Computation Based on Density Functional Theory”. *Solid State Phenomena*, 345, 139-146. DOI:[10.4028/p-P4Dof7](https://doi.org/10.4028/p-P4Dof7)
- Fauzan MRA, Satya TP, Setyawan G, Fahrurrozi I, Puspasari F, Partini J and **Sholihun, S.** (2021). “Adsorption of Toxic Heavy Metal Methylmercury (MeHg) on Germanene in Aqueous Environment: A First-Principles Study”. *Indonesian Journal of Chemistry*. 21 1484. DOI: [10.22146/ijc.66902](https://doi.org/10.22146/ijc.66902)
- Georgakilas, V., Pellarini, F., Prato, M., Guldi, D.M., Melle-Franco, M., dan Zerbetto, F. (2002). “Supramolecular self-assembled fullerene nanostructures” *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 99, 5075. DOI: [10.1073/pnas.072006599](https://doi.org/10.1073/pnas.072006599).
- Georgescu, I.M., Ashhab, S., dan Nori, F. (2014). “Quantum simulation”. *Review of Modern Physics*, 86, 0034-6861. DOI: [10.1103/RevModPhys.86.153](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.153)
- Goyal, K., Bera, C. dan Sardana, N. (2022). “Temperature-dependent structural, mechanical, and thermodynamic properties of B2-

- phase Ti₂AlNb for aerospace applications”. *J. Mater. Sci.*, 57, 19553–19570. DOI:10.1007/s10853-022-07788-3
- Grimme, S., Antony, J., Schwabe, T. dan Lichtenfeld, C.M., (2007), “Density functional theory with dispersion corrections for supramolecular structures, aggregates, and complexes of (bio)organic molecules”, *Org. Biomol. Chem.*, 5, 741-758. DOI: 10.1039/B615319B
- Hartmann, E. (2001). “An Introduction to Crystal Physics”. *International Union of Crystallography*, University College Cardiff Press Cardiff, Wales.
- Hastuti DP, Amalia W, Priska Z, Nurwantoro P and **Sholihun**. (2020). “First-principles density- functional-theory calculations of formation and dissociation energies in germanene multivacancies”. *Mater Today Commun.* 22 100754. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2019.100754
- Hastuti DP, Nurwantoro P and **Sholihun**. (2019). “Stability study of germanene vacancies: The first-principles calculations”. *Mater Today Commun.* 19 459. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2019.04.003
- Hidayati, S., Santoso, I., Yunitasari, S., dan **Sholihun**. (2022). “Electronic-Structures Calculations of Calcium-Intercalated Bilayer Graphene: A First-Principle Study”. *Indones. J. Chem.*, 22, 6, 1605-1611. DOI:10.22146/ijc.75647
- Hohenberg, P., dan Kohn, W. (1964). “Inhomogeneous electron gas”. *Physical review*, 136, 3B, B864. DOI:10.1103/PhysRev.136.B864
- Hoja, J., Reilly, A.M., dan Tkatchenko, A. (2016). “First-principles modeling of molecular crystals: structures and stabilities, temperature and pressure”. *WIREs Comput. Mol. Sci.*, 7, 1, e1294. DOI:10.1002/wcms.1294
- Houtsma, R.S.K., de la Rie, J., dan Stöhr, M. (2021). “Atomically precise graphene nanoribbons: interplay of structural and electronic properties”. *Chem. Soc. Rev.*, 50, 6541-6568. DOI:10.1039/D0CS01541E
- Igumbor, E. (2017). “Tesis: Hybrid functional study of point defects in germanium”. Fakultas Ilmu Pengetahuan Alam dan Pertanian, Universitas Pretoria.

- Kang, M., Ye, L., Fang, S. (2020). "Dirac fermions and flat bands in the ideal kagome metal FeSn" *Nat. Mater.*, 19, 163–169. DOI: 10.1038/s41563-019-0531-0
- Kohn, W. (1999). "Electronic structure of matter-wave functions and density functionals", *Rev. Mod. Phys.*, 71 (5), 1253-1266. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.71.1253>
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). "Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects." *Physical Review*, 140(4A), A1133-A1138. DOI:10.1103/PhysRev.140. A1133
- Kristiawan, B., Apriati, Y.N., Nugraheni, A.D., and **Sholihun, S.** (2024). "A density-functional theory study of the interaction of rimantadine drug molecule with X-doped fullerene (X = B, Al, Ga, Si, Ge, BN, AlN, GaN, SiN, GeN)." *Adv. Nat. Sci: Nanosci. Nanotechnol.*, 15 045017. DOI: 10.1088/2043-6262/ad8cb5.
- Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F. dan Smalley, R. E. (1985). "C60: Buckminsterfullerene" *Nature*, 318, 162. DOI: 10.1038/318162a0.
- Kumar, M. dan Raza, K. (2018). "C60-fullerenes as drug delivery carriers for anticancer agents: promises and hurdles". *Pharmaceut. Nanotechnol.* 5, 3, 169-179. DOI: 10.2174/2211738505666170301142232.
- Layegh, M., Yan, P., dan Bennett, J.W. (2024). "The formation and stability of 3D and 2D materials". *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 70, 1, 100615. DOI:[10.1016/j.pcrysgrow.2023.100615](https://doi.org/10.1016/j.pcrysgrow.2023.100615)
- Lin, G., Zhang, H. dan Huang, L. (2015). "Smart polymeric nanoparticles for cancer gene delivery". *Mol. Pharmaceut.* 12, 314. DOI:10.1021/mp500656v
- Liu, Z., Li, M., Wang, Q. (2020). "Orbital-selective Dirac fermions and extremely flat bands in frustrated kagome-lattice metal CoSn". *Nat. Commun.*, 11 4002. DOI: 10.1038/s41467-020-17462-4
- Lubis P, Amalia N, Wella SA and **Sholihun, S.** (2022). "Thermoelectric properties of monolayer and bilayer buckled XTe (X = Ge, Sn, and Pb)". *Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology*, 13, 025008. DOI: 10.1088/2043-6262/ac7322

- Luo, S., Chen, X., He, Y., Gu, Y., Zhu, C., Yang, Y., dan Qu, L. (2021). "Recent advances in graphene nanoribbons for biosensing and biomedicine". *J. Mater. Chem. B*, 9, 6129. DOI:10.1039/d1tb00871d
- Macchi, P. (2009). "Electron Density Distribution in Organometallic Materials". *chimia*, 63, 1-2. DOI:10.2533/chimia.2009.29
- Martin, R.M. (2004). "Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods". Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1, 53, 119-152.
- Michos, F.I., Chronis, A.G., Garoufalidis, C.S., dan Sigalas, M.M. (2024). "Optical properties of Cu, Ag, and Au nanoparticles with different sizes and shapes". *Applied Research*, 3, 4, e202300101. DOI:10.1002/appl.202300101
- Moon, S., Kim, J., Park, J., Im, S., Kim, J., Hwang, I., dan Kim, J. (2022). "Hexagonal Boron Nitride for Next-Generation Photonics and Electronics". *Advanced Materials*, 34, 4. DOI: 10.1002/adma.202204161
- Mueller, T. dan Malic, E. (2018). "Exciton physics and device application of two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors". *npj 2D Materials and Applications*, 2, 29. DOI:10.1038/s41699-018-0074-2
- Nurwantoro P, Yunitasari S, Prayogi H, Hidayati S, and **Sholihun, S.** (2024). "First-principles density functional theory for the structural, electronic, and phonon calculations of Ca-doped bilayer graphene". *Int J Comput Mater Sci Eng*. 2450004. DOI: 10.1142/S2047684124500040
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). "Density Functional Theory for Materials Science". *Physical Review Letters*, 77(18), 3865-3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
- Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J., dan Fiolhais, C. (1992). "Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation". *Physical Review B*, 46, 6671-6687. DOI:10.1103/PhysRevB.46.6671
- Priska, Z., Hidayati, S., **Sholihun, S.**, Amalia, W. and Nurwantoro, P. (2021). "Hydrogen and Water Adsorptions on Monolayer

Hexagonal Boron Nitride (h-BN): The First-Principles Calculations”. *Symposium of Materials Science and Chemistry III: Key Engineering Materials*. 884 387. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.884.387

- Purnawati, D., Fajariah, N., Prayogi, H., Bermundo, J.P., Nugraheni, A.D., dan **Sholihun**. (2023). “Dissociation-energy calculations of C-multivacancies in diamond: the densityfunctional-theory study”. *Japanese Journal of Applied Physics*, 62, 051002. DOI:10.35848/1347-4065/accda7
- Reshak, A.H., Stys, D., Auluck, S., Ktyk. I. (2011). “Dispersion of linear and nonlinear optical susceptibilities and the hyperpolarizability of 3-methyl-4-phenyl-5-(2-pyridyl)-1, 2, 4-triazole”. *Chem. Phys.*, 13, 2945-2952. DOI:10.1039/C0CP01601B
- Rositawati, D.N, Widiyanto, E., Lukmantoro, A., Absor, M.A.U., **Sholihun**, Triyana, K., dan Santoso, I. (2023). “Significantly enhanced thermoelectric performance of interstitial N-doped graphene: A density functional theory study”. *Physica B*, 677, 41571. DOI: 10.1016/j.physb.2024.415711
- Samajdar, R., Ho, W.W., Pichler, H., Lukin, M.D. dan Sachdev, S. (2021). “Quantum phases of Rydberg atoms on a kagome lattice”. *PNAS*, 118, e2015785118. DOI: 10.1073/pnas.2015785118.
- Sari, N.A., Apriati, Y.N., Nugraheni, A.D., **Sholihun**. (2024). “Adsorption and formation energies of nucleobase-Fullerene: A first-principles simulation”. *Int. J. Mod. Phys. B.*, 2550050. DOI: 10.1142/S021797922550050X
- Sholihun** dan Bagariang, H.S. (2023). “Defect formation energies of Ag- and Sr-doped 3C-SiC: A first-principles study”. *International Journal of Computational Materials Science and Engineering*, 2350041. DOI:10.1142/S2047684123500410
- Sholihun**, S., Saito, M., Ohno, T. and Yamasaki, T. (2015). “Density-functional-theory-based calculations of formation energy and concentration of the silicon monovacancy”. *Jpn J Appl Phys.*, 54, 041301. DOI: 10.7567/JJAP.54.041301
- Sholihun**, Amalia, W., Hastuti, D.P., Nurwantoro, P., Nugraheni, A.D. dan Budhi, R.H.S. (2019). “Magic vacancy-numbers in h-BN

- multivacancies: The first-principles study”. *Mater Today Commun.*, 20, 100591. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2019.100591
- Sholihun**, Ishii, F. dan Saito, M. (2016). “First-principles calculations of multivacancies in germanium”. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 55, 011301. DOI: 10.7567/JJAP.55.011301
- Sholihun**, Kadarisman, H. P., dan Nurwantoro, P. (2018). “Density-functional-theory calculations of formation energy of the nitrogen-doped diamond”. *Indonesian Journal of Chemistry*, 18, 749. DOI: 10.22146/ijc.26785
- Sholihun**, Purnawati, D., Bermundo, J.P., Prayogi, H., Fatomi, Z.S. dan Hidayati, S. (2023). “Novel two-dimensional square-structured diatomic group-IV materials: the first-principles prediction”. *Phys. Scr.*, 98, 115903. DOI:10.1088/1402-4896/acfa3f
- Sholl, D.S. dan Steckel J.A. (2022). “Density-Functional Theory: A Practical Introduction”. *John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey*.
- Soleimani-Amiri, S., Ghobadi, N., dan Rudi, S.G. (2024). “Janus XMPYS (X=Se, Te; M=Mo, W; Y=Al, Ga) monolayers with enhanced spintronic properties and boosted solar-to-hydrogen efficiency for photocatalytic water splitting”. *International Journal of Hydrogen Energy*, 72, 506-520. DOI:10.1016/j.ijhydene.2024.05.384
- Srivastava, D., Makeev, M. A., Menon, M., dan Osman, M. (2008). “Computational Nanomechanics and Thermal Transport in Nanotubes and Nanowires”. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 8, 7, 3628-3651(24). DOI: 10.1166/jnn.2008.18330
- Strand, J., Larcher, L., dan Shluger, A. (2019). “Properties of intrinsic point defects and dimers in hexagonal boron nitride”. *J. Phys. Condens. Matter.*, 32, 055706. DOI:10.1088/1361-648X/ab4e5d
- Syariati, R., Minami, S., Sawaahata, H., dan Ishii, F. (2020). “First-principles study of anomalous Nernst effect in half-metallic iron dichloride monolayer”. *APL Mater.*, 8, 041105. DOI: 10.1063/1.5143474
- Taylor, C.D. dan Ke, H. (2021). “Investigations of the intrinsic corrosion and hydrogen susceptibility of metals and alloys using

- density functional theory". *Corros Rev.*, 39, 3, 177-209. DOI: [10.1515/correv-2020-0094](https://doi.org/10.1515/correv-2020-0094)
- Teng, X., Oh, J.S., Tan, H. (2023). "Magnetism and charge density wave order in kagome FeGe". *Nat. Phys.*, 19, 814–822. DOI: [10.1038/s41567-023-01985-w](https://doi.org/10.1038/s41567-023-01985-w)
- Umam, K., **Sholihun**, Nurwantoro, P., Absor, M.A.U., Nugraheni, A.D. dan Budhi, R.H.S. (2018). "Biaxial strain effects on the electronic properties of silicene: The density-functional-theory-based calculations". *Journal of Physics: Conference Series.*, 1011, 012074. DOI: [10.1088/1742-6596/1011/1/012074](https://doi.org/10.1088/1742-6596/1011/1/012074)
- Xu, X. dan Goddard W.A. (2004). "The X3LYP extended density functional for accurate descriptions of nonbond interactions, spin states, and thermochemical properties". *PNAS*, 101 (9), 2673-2677. DOI: [10.1073/pnas.0308730100](https://doi.org/10.1073/pnas.0308730100)
- Yang, H., Gao, F., Dai, M., Jia, D., Zhou, Y., dan Hu, P. (2017). "Recent advances in preparation, properties and device applications of two-dimensional h-BN and its vertical heterostructures". *J. Semicond.*, 38, 031004. DOI: [10.1088/1674-4926/38/3/031004](https://doi.org/10.1088/1674-4926/38/3/031004)
- Ye, L., Kollie, L., Liu, X., Guo, W., Ying, X., Zhu, J., Yang, S., dan Yu, M. (2021). "Antitumor activity and potential mechanism of novel fullerene derivative nanoparticles". *Molecules*, 26, 3252. DOI: [10.3390/molecules26113252](https://doi.org/10.3390/molecules26113252).
- Zhang, G., Cheng, Y., Chou, J. dan Gali, A. (2020). "Material platforms for defect qubits and single-photon emitters". *Appl. Phys. Rev.*, 7, 031308. DOI: [10.1063/5.0006075](https://doi.org/10.1063/5.0006075)
- Zhang, I., Wu, J., dan Xu, X. (2010). "Extending the reliability and applicability of B3LYP". *Chem. Commun.*, 46, 3057-3070. DOI: [10.1039/C000677G](https://doi.org/10.1039/C000677G)
- Zhou, X.Y., Rong, C., Lu, T., Zhou, P., dan Liu, S. (2016). "Information Functional Theory: Electronic Properties as Functionals of Information for Atoms and Molecules". *J. Phys. Chem. A*, 120, 20, 3634–3642. DOI: [10.1021/acs.jpca.6b01197](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.6b01197)

BIODATA



Data Diri

Nama : Prof. Sholihun, S.Si., M.Sc.,
Ph.D.Sc
Tempat/Tanggal Lahir : Pati, 3 Mei 1984
Jabatan/Pangkat/Golongan : Guru Besar/Pembina/ IVa
Program Studi/Departemen : Fisika
Fakultas/Sekolah : MIPA
Bidang Ilmu : Desain Komputasi Kristal dan
Molekuler
Alamat surel (email) : sholihun@ugm.ac.id
Author ID Scopus : 56578598700
Author ID Sinta : 43387

Keluarga

Istri : Titan Parasita Siradj, S.Si., M.Sc.
Anak : 1. Naila Atsmar Al Fikriyya
2. Najma Manar Alfadh
3. Ajmal Al Afkar
4. Afnan Syarof Al Kaf

Riwayat Pendidikan

Tahun	Pendidikan
2012 – 2015	Program Doktor: <i>Division of Mathematical and Physical Sciences</i> , Kanazawa University (Jepang)
2008 – 2009	Program Magister Fisika: Departemen Fisika UGM

2004 – 2008	Program Sarjana Fisika: Departemen Fisika UGM
2002 – 2004	Madrasah Aliyah: Raudlatul Ulum (Pati)
2000 – 2002	Madrasah Tsanawiyah: Raudlatul Ulum (Pati)
1994 – 2000	Madrasah Ibtidaiyah: Darul Ulum (Pati)
1993 – 1999	Sekolah Dasar: SDN Sambilawang (Pati)

Riwayat Pekerjaan

Tahun	Pekerjaan
2009 – sekarang	Dosen Departemen Fisika FMIPA UGM
2021 – sekarang	Ketua Program Studi Doktor Fisika FMIPA UGM
2016 – 2021	Ketua Unit Pendukung P2M FMIPA UGM

Organisasi

Tahun	Organisasi
2009 – sekarang	<i>Physical Society of Indonesia</i>
2021 – 2022	<i>American Chemical Society</i>

Penghargaan

Tahun	Nama Penghargaan	Pemberi Penghargaan
2022	Penelitian Non-Paten Terbaik	Universitas Gadjah Mada
2016 – sekarang	<i>Collaborative Professor</i>	Kanazawa University (Jepang)

Karya Buku

Tahun	Judul Buku	Penerbit
2021	Pemograman dan Komputasi Numerik Menggunakan Python	UGM Press
2024	Aplikasi Python dalam Komputasi Numerik untuk Permasalahan Multivariabel	UGM Press

Publikasi Ilmiah Pilihan

No	PUBLIKASI
1	Kristiawan B, Apriati YN, Nugraheni AD, and Sholihun S (2024) ‘A density-functional theory study of the interaction of rimantadine drug molecule with X-doped fullerene (X = B, Al, Ga, Si, Ge, BN, AlN, GaN, SiN, GeN).’ <i>Adv. Nat. Sci: Nanosci. Nanotechnol.</i> , 15 045017. doi: 10.1088/2043-6262/ad8cb5.
2	Fadllyyana M, Fajariah N, Nurwantoro P, Prayogi H, Purnawati D, Oktavina CW, Nugraheni AD, Sholihun S (2024) ‘Structural Stability of Vacancy and Substitutional Defects in g-GaN: A First-Principles Study’, <i>Trends in Sciences</i> 21(12):8592. doi: https://doi.org/10.48048/tis.2024.8592 .
3	Jannah N, Apriati YN, Nugraheni AD, Sholihun (2024) ‘Adsorption Energies of X-Doped Fullerene (X = Si, Sn, BN): A First-Principles Study’, <i>Key Engineering Materials</i> . 990 117-121. doi: https://doi.org/10.4028/p-4Dwjyf .
4	Zain F, Widayanti, and Sholihun (2024) ‘Biaxial and Uniaxial Strain Effect on Structural and Electronic Properties of Anatase TiO ₂ : A First-Principle Calculation’, <i>Key Engineering Materials</i> . 990 123-131. doi: https://doi.org/10.4028/p-SgS5YO .
5	Fadllyyana M, Oktavina CW, Fajariah N, Nugraheni AD and Sholihun (2024) ‘Atomic defects (vacancy, substitutional, and Stone-Wales) in monolayer aluminum nitride: a density-functional-theory simulation’, <i>Journal of Physics: Conference Series</i> . 2866 (2024) 012040. doi:10.1088/1742-6596/2866/1/012040.
6	Oktavina CW, Fajariah N, Fadllyyana M, Nugraheni AD and Sholihun (2024) ‘New 5-6-6-5 (fourfold) and 5-9-6 defect Configurations in g-SiC (graphene-like hexagonal monolayer silicon carbide)’, <i>Journal of Physics: Conference Series</i> . 2866 012037. doi:10.1088/1742-6596/2866/1/012037
7	Fajariah N, Fadllyyana M, Purnawati D, Prayogi H, Nugraheni AD, and Sholihun S (2024) ‘Structural, Energetic, and Electronic Properties of H-Interstitial in C-Monovacancy: A

	First-Principles Density Functional Theory’, <i>Trends in Science</i> . 21 7657. doi:10.48048/tis.2024.7657.
8	Bandhaso D, Lukmantoro A, Sholihun (2024) ‘A Comparative Study of EOS (Equation of States) Models for Fitting Energy Versus Volume Data in Thermodynamics’, <i>Journal Online of Physics</i> 9 102-106. doi: 10.22437/jop.v9i2.31973.
9	Sari NA, Apriati YN, Nugraheni AD, Sholihun (2024) ‘Adsorption and formation energies of nucleobase-Fullerene: A first-principles simulation’, <i>Int J Mod Phys B</i> . 2550050. doi: 10.1142/S021797922550050X.
10	Amalia F, Nugraheni AD, Sholihun S (2024) ‘First-principles study on structural ad electronic properties of P3HT-graphene’, <i>Journal of Metals, Materials and Minerals</i> . 34 1833. doi: 10.55713/jmmm.v34i1.1833.
11	Nurwantoro P, Yunitasari S, Prayogi H, Hidayati S, and Sholihun S (2024) ‘First-principles density functional theory for the structural, electronic, and phonon calculations of Ca-doped bilayer graphene’, <i>Int J Comput Mater Sci Eng</i> . 2450004. doi: 10.1142/S2047684124500040.
12	Rositawati DN, Widiyanto E, Lukmantoro A, Absor MAU, Sholihun , Triyana K and Santoso I (2024) ‘Significantly enhanced thermoelectric performance of interstitial N-doped graphene: A density functional theory study’, <i>Physica B Condens Matter</i> . 677 415711. doi: 10.1016/j.physb.2024.415711.
13	Ramadhan, Ravidho; Marzuki, Marzuki; Suryanto, Wiwit; Sholihun , Sholihun; Yusnaini, Helmi; Hashiguchi, Hiroyuki; and Shimomai, Toyoshi (2024) ‘Evaluating Validation Methods for Satellite Precipitation Products Using Point Gauge Observations over Complex Topography’, <i>Springer Proceedings in Physics</i> . 305 547 – 556. doi: 10.1007/978-981-97-0740-9_49.
14	Ramadhan, Ravidho; Marzuki, Marzuki; Suryanto, Wiwit; Sholihun , Sholihun; Yusnaini, Helmi (2024) ‘Seasonal Changes of Diurnal Rainfall Over New Capital City of Indonesia from High-Resolution Satellite Data’, <i>Springer Proceedings in Physics</i> . 305 465 – 473. doi: 10.1007/978-981-97-0740-9_41.

15	Ramadhan R, Marzuki M, Suryanto W, Sholihun S , Yusraini H, and Muharsyah R (2024) 'Rainfall variability in Indonesia new capital associated with the Madden-Julian Oscillation and its contribution to flood events. <i>Quaternary Science Advances</i> ', <i>Quaternary Science Advances</i> . 13 100163. doi: 10.1016/j.qsa.2024.100163.
16	Apriati YN, Kristiawan B, Jannah N, Nugraheni AD, Sholihun S (2023) 'Drug-Molecule Adsorption onto Silicon-Doped Fullerene: A Density Functional Theory Study', <i>Indonesian Journal of Chemistry</i> . 23 1742. doi: 10.22146/ijc.84174.
17	Hermanto A, Prayogi H, Nugraheni AD, Partini J, Sholihun S (2023) 'Quantum-based first-principles study of gas molecules (O ₂ , CO ₂ , NO ₂) interaction on monolayer germanene', <i>Journal of Metals, Materials and Minerals</i> . 33 1711. doi: 10.55713/jmmm.v33i4.1711.
18	Sholihun S , Bagariang HS, Absor MAU, Andiwijayakusuma D (2023) 'Defect formation energies of Ag- and Sr-doped 3C-SiC: A first-principles study', <i>Int J Comput Mater Sci Eng</i> . 2350041. doi: 10.1142/S2047684123500410.
19	Sholihun S , Purnawati D, Bermundo JP, Prayogi H, Fatomi ZS, and Hidayati S (2023) 'Novel two-dimensional square-structured diatomic group-IV materials: the first-principles prediction', <i>Phys Scr</i> . 98 115903. doi: 10.1088/1402-4896/acfa3f.
20	Khanifah S, Legowo ADK, Sholihun S , and Nugraheni AD (2023) 'Physical Properties of Polyvinyl Alcohol/Chitosan Films with the Addition of Anthocyanin Extract from Butterfly Pea for Food Packaging Applications', <i>Indonesian Journal of Chemistry</i> . 23 1021. doi: 10.22146/ijc.80946.
21	Fatomi ZS, Nugraheni AD, and Sholihun (2023) 'Atomic Vibrational Effect on Vacancy Concentration of Gray Tin (α -Sn): Computation Based on Density Functional Theory', <i>Solid State Phenomena. Trans Tech Publications Ltd</i> . 345 139-146. doi: 10.4028/p-P4Dof7.
22	Nurmayasari, Kurniasari SA, Sholihun , and Nugraheni AD (2023) 'The Effectiveness of Coffee Waste Ground by Simple Washing on the Adsorption of Methylene Blue', <i>Key</i>

	<i>Engineering Materials</i> , Trans Tech Publications Ltd. 949 103-109. doi: 10.4028/p-E5PAgL.
23	Purnawati D, Fajariah N, Prayogi H, Bermundo JP, Nugraheni AD, and Sholihun S (2023) ‘Dissociation-energy calculations of C-multivacancies in diamond: the density-functional-theory study’, <i>Jpn J Appl Phys.</i> 62 051002. doi: 10.35848/1347-4065/acda7.
24	Yusnaini H, Ramadhan R, Marzuki M, Ningsih AP, Hashiguchi H, Shimomai T, Vonnisa M, Harmadi H, Suryanto W, Sholihun S (2022) ‘Statistical Comparison of IMERG Precipitation Products with Optical Rain Gauge Observations over Kototabang, Indonesia’, <i>Jurnal Ilmu Fisika Universitas Andalas.</i> 14 10-20. doi: 10.25077/jif.14.1.10-20.2022.
25	Ramadhan R, Marzuki M, Yusnaini H, Ningsih AP, Hashiguchi H, Shimomai T, Vonnisa M, Ulfah S, Suryanto W, and Sholihun S (2022) ‘Ground Validation of GPM IMERG-F Precipitation Products with the Point Rain Gauge Records on the Extreme Rainfall Over a Mountainous Area of Sumatra Island’, <i>Jurnal Penelitian Pendidikan IPA.</i> 8 163-170. doi: 10.29303/jppipa.v8i1.1155.
26	Ramadhan R, Marzuki M, Suryanto W, Sholihun S , Yusnaini H, Muharsyah R, Hanif M (2022) ‘Trends in rainfall and hydrometeorological disasters in new capital city of Indonesia from long-term satellite-based precipitation product’, <i>Remote Sens Appl.</i> 28 100827. doi: 10.1016/j.rsase.2022.100827.
27	Ramadhan R, Muharsyah R, Marzuki, Yusnaini H, Vonnisa M, Hashiguchi H, Suryanto W, and Sholihun (2022) ‘Evaluation of GPM IMERG Products for Extreme Precipitation over Indonesia’, <i>Journal of Physics: Conference Series.</i> 2309 012008. doi: 10.1088/1742-6596/2309/1/012008.
28	Hidayati S, Santoso I, Yunitasari S and Sholihun S (2022) ‘Electronic-Structures Calculations of Calcium-Intercalated Bilayer Graphene: A First-Principle Study’, <i>Indonesian Journal of Chemistry.</i> 22 1605. doi: 10.22146/ijc.75647.
29	Hidayati S, Sholihun (2022) ‘Strain Effects on the Band Structures of Monolayer GaN from the Density Functional

	Theory', <i>Materials Science Forum</i> . 1066 144. doi: 10.4028/p-d64712.
30	Apriati YN, Dwi Nugraheni A and Sholihun S (2022) 'Interaction of C60 with Small Molecules: Adsorption-Inclusion Energy Calculation Using the Density Functional Theory', <i>Materials Science Forum</i> . 1066 135. doi: 10.4028/p-ea93gt.
31	Apriati YN, Fendinugroho, Nugroho CIW, Barus P, Lestari RI, Kahfi AZA and Sholihun (2022) 'Metode Komputasi Sederhana untuk Menentukan Saddle Point Sistem Bumi-Bulan-Matahari dengan Akurat', <i>Artikel Riset</i> . doi: 10.22146/jfi.v25i1.61782. 32.
32	Fatomi Z S, Nugraheni A D and Sholihun (2022) 'Vibrational effect on vacancy concentration in diamond: The density-functional-theory calculation', <i>Computational Condensed Matter</i> . 32 e00708. doi: 10.1016/j.cocom.2022.e00708.
33	Lubis P, Amalia N, Wella SA and Sholihun S (2022) 'Thermoelectric properties of monolayer and bilayer buckled XTe (X = Ge, Sn, and Pb)', <i>Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology</i> . 13 025008. doi: 10.1088/2043-6262/ac7322.
34	Ramadhan R, Yusnaini H, Marzuki M, Muharsyah R, Suryanto W, Sholihun S , Vonnisa M, Harmadi H, Ningsih A P, Battaglia A, Hashiguchi H and Tokay A (2022) 'Evaluation of GPM IMERG Performance Using Gauge Data over Indonesian Maritime Continent at Different Time Scales <i>Remote Sens (Basel)</i> ', <i>Remote Sens</i> . 14 1172. doi: 10.3390/rs14051172.
35	Ramadhan R, Marzuki M, Yusnaini H, Muharsyah R, Suryanto W, Sholihun S , Vonnisa M, Battaglia A and Hashiguchi H (2022) 'Capability of GPM IMERG Products for Extreme Precipitation Analysis over the Indonesian Maritime Continent', <i>Remote Sens (Basel)</i> . 14 412. doi: 10.3390/rs14020412.
36	Fauzan MRA, Satya TP, Setyawan G, Fahrurrozi I, Puspasari F, Partini J and Sholihun S (2021) 'Adsorption of Toxic Heavy Metal Methylmercury (MeHg) on Germanene in Aqueous Environment: A First-Principles Study', <i>Indonesian Journal of Chemistry</i> . 21 1484. doi: 10.22146/ijc.66902.

37	Priska Z, Hidayati S, Sholihun S , Amalia W and Nurwantoro P (2021) ‘Hydrogen and Water Adsorptions on Monolayer Hexagonal Boron Nitride (h-BN): The First-Principles Calculations’, <i>Symposium of Materials Science and Chemistry III: Key Engineering Materials</i> . 884 387. doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.884.387.
38	Muslim R, Anugraha R, Sholihun S and Rosyid MF (2021) ‘Phase transition and universality of the three-one spin interaction based on the majority-rule model’, <i>International Journal of Modern Physics C</i> . 2150115. doi: 10.1142/S0129183121501151.
39	Muslim R, Anugraha Nqz R, Sholihun S and Rosyid MF (2020) ‘The External Field-Like Effect to the Evolution of Public Opinion in the Stauffer-Galam Model’, <i>Int J of Engineering Research & Technology</i> . 9 12.
40	Muslim R, Anugraha R, Sholihun S and Rosyid MF (2020) ‘Phase transition of the Sznajd model with anticonformity for two different agent configurations’, <i>International Journal of Modern Physics C</i> . 31 2050052. doi: 10.1142/S0129183120500527.
41	Ariasoca TA, Sholihun and Santoso I (2019) ‘Trotter-Suzuki-time propagation method for calculating the density of states of disordered graphene’, <i>Comput Mater Sci</i> . 156 434. doi: 10.1016/j.commatsci.2018.10.016.
42	Hastuti DP, Amalia W, Priska Z, Nurwantoro P and Sholihun (2020) ‘First-principles density-functional-theory calculations of formation and dissociation energies in germanene multivacancies’, <i>Mater Today Commun</i> . 22 100754. doi: 10.1016/j.mtcomm.2019.100754
43	Sholihun , Amalia W, Hastuti DP, Nurwantoro P, Nugraheni AD and Budhi RHS (2019) ‘Magic vacancy-numbers in h-BN multivacancies: The first-principles study’, <i>Mater Today Commun</i> . 20 100591. doi: 10.1016/j.mtcomm.2019.100591.
44	Hastuti DP, Nurwantoro P and Sholihun (2019) ‘Stability study of germanene vacancies: The first-principles calculations’,

	<i>Mater Today Commun.</i> 19 459. doi: 10.1016/j.mtcomm.2019.04.003.
45	Amalia W, Nurwantoro P and Sholihun (2019) ‘Density-functional-theory calculations of structural and electronic properties of vacancies in monolayer hexagonal boron nitride (h-BN)’, <i>Computational Condensed Matter</i> . 18 e00354. doi: 10.1016/j.cocom.2018.e00354.
46	Sholihun , Kadarisman H P and Nurwantoro P (2018) ‘Density-functional-theory calculations of formation energy of the nitrogen-doped diamond’, <i>Indonesian Journal of Chemistry</i> . 18 749. doi: 10.22146/ijc.26785.
47	Umam K, Sholihun , Nurwantoro P, Ulil Absor MA, Nugraheni AD and Budhi RHS (2018) ‘Biaxial strain effects on the electronic properties of silicene: The density-functional-theory-based calculations’, <i>Journal of Physics: Conference Series</i> . 1011 012074. doi: 10.1088/1742-6596/1011/1/012074.
48	Sholihun , Ishii F and Saito M (2016) ‘First-principles calculations of multivacancies in germanium’, <i>Jpn J Appl Phys</i> . 55 011301. doi: 10.7567/JJAP.55.011301.
49	Sholihun S , Saito M, Ohno T and Yamasaki T (2015) ‘Density-functional-theory-based calculations of formation energy and concentration of the silicon monovacancy’, <i>Jpn J Appl Phys</i> . 54 041301. doi: 10.7567/JJAP.54.041301.

Pengalaman Riset dalam 3 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Penelitian	Keterangan	Sumber Pendanaan
1	2024	Komputasi Struktur Elektronik dan Energi Formasi Defective Two-dimensional Group III-V Materials untuk Peranti High-	Hibah Postdoctoral	Universitas Gadjah Mada

		Electron-Mobility Transistors (HEMT)		
2	2024	Pemodelan berbasis kuantum material struktur <i>honeycomb</i> dan diamond dengan <i>vacancy defect</i> untuk pengembangan peranti tfet (<i>tunneling field-effect transistors</i>)	Hibah Rekognisi Tugas Akhir	Universitas Gadjah Mada
3	2023	Komputasi Kuantum Struktur Elektronik Material Dua Dimensi (Germanene dan Silicene) untuk Pengembangan Sistem Ultra-Fast Tfet (Tunneling Field Effect Transistor)	Penelitian Dasar	RISTEKDIKTI
4	2022	Rekayasa Bandgap pada Material Intan dengan Terminasi Hidrogen untuk Aplikasi Piranti Optoelektronik	Hibah Postdoctoral	Universitas Gadjah Mada
5	2022	Rancang bangun hpc (high-performance computing) portabel dan aplikasinya untuk perhitungan sistem material kuantum	Program Insentif Startup & Inovasi PT 2022	RISTEKDIKTI
6	2022	Komputasi Kuantum Struktur Elektronik Material Dua Dimensi	Penelitian Dasar	RISTEKDIKTI

		(Germanene dan Silicene) untuk Pengembangan Sistem Ultra-Fast Tfet (Tunneling Field Effect Transistor)		
7	2021	Komputasi Kuantum Struktur Elektronik Material Dua Dimensi (Germanene dan Silicene) untuk Pengembangan Sistem Ultra-Fast Tfet (Tunneling Field Effect Transistor)	Penelitian Dasar	RISTEKDIKTI

Perolehan HKI dalam 3 Tahun Terakhir

No	Judul/Tema HKI	Tahun	Jenis	Nomor P/ID
1	Program Komputer DOS-FIT	2024	Hak Cipta: Program Komputer	EC00202 407616
2	Program Komputer EV-FIT	2024	Hak Cipta: Program Komputer	EC00202 405643
3.	3D-SEMSP: Program Komputer Berbasis Console Untuk Perhitungan Saddle Point Sistem Matahari-Bumi-Bulan Dalam Koordinat Kartesian 3D	2024	Hak Cipta: Program Komputer	EC00202 401463
4	Program Komputer PHOLTAcodes	2023	Hak Cipta: Program Komputer	EC00202 346173

5	Program Komputer Int2D	2023	Hak Cipta: Program Komputer	EC00202 3105919
6	Pemrograman Paralel Multicore dengan MPI4PY	2022	Hak Cipta: Modul	EC00202 277184
7	Pemrograman Dan Komputasi Numerik Menggunakan Python	2021	Hak Cipta: Buku	EC00202 146471