

**LAPORAN
PENELITIAN HIBAH APBU**



**KARAKTERISASI SPEKTRAL LOGAM TRANSISI TRIVALEN KROMIUM
PADA SENYAWA KRISTAL ALUMINIUM OKSIDA**

Oleh :

Mega Novita, M.Si., M.Nat.Sc., Ph.D	NPP.158801493
Setyoningsih Wibowo, ST., M.Kom	NPP.137501389
Noora Qotrun Nada, ST., M.Eng.	NPP.158201485

**LEMBAGA PENELITIAN DAN PENGABDIAN KEPADA MASYARAKAT
UNIVERSITAS PGRI SEMARANG
DESEMBER 2018**

HALAMAN PENGESAHAN

1. Judul Penelitian : Karakterisasi Spektral Logam Transisi Trivalen Kromium Pada Senyawa Kristal Aluminium Oksida
2. Bidang Penelitian : Informatika
3. Ketua Penelitian
 - a. Nama Lengkap : Mega Novita, M.Si., M.Nat.Sc., Ph.D.
 - b. Jenis Kelamin : Perempuan
 - c. N P P : 158801493
 - d. Bidang Ilmu : Teknik Kimia
 - e. Jabatan Fungsional : Lektor / IIIc
 - f. Jabatan Struktural : Dosen Tetap Program Studi Informatika
 - g. Prodi/Jurusan : Informatika / Teknik dan Informatika
 - h. Alamat : Jl. Sidodadi Timur No. 24 (Dr. Cipto) Semarang
 - i. Telepon/HP : - / 085867312111
4. Jumlah Anggota Peneliti : 2 (dua) orang
Nama Anggota : 1. Setyoningsih Wibowo, ST., M.Kom
2. Noora Qotrun Nada M.Eng
Tempat Penelitian : Universitas PGRI Semarang
5. Biaya Penelitian : Rp. 10.000.000,- (Sepuluh Juta Rupiah)

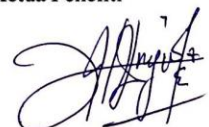
Semarang, 4 Desember 2018

Mengetahui,
Dekan Fakultas Teknik,



Dr. Baubang Supriyadi, MP
N I P. 195410151982031003

Ketua Peneliti



Mega Novita, M.Si., M.Nat.Sc., Ph.D.
N P P. 158801493

Menyetujui,
Plt. Ketua Lembaga
Penelitian dan Pengabdian Kepada Masyarakat



Dr. Rasiman, M.Pd.
N I P. 195602181986031001

ABSTRAK

Pada penelitian ini, kami melakukan studi perbandingan pada energi R-line dan U-band dari materi $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3:\text{Cr}^{3+}$, atau yang biasa dikenal sebagai batu rubi. Estimasi R-line dan U-band yang dilakukan dengan pendekatan satu-elektron dan banyak-elektron berbasis *first-principles calculations* ini tanpa mengacu pada parameter eksperimen apapun. Meskipun penelitian tentang perhitungan ab-initio dari spektrum absorpsi dan energi multiplet rubi berdasarkan pendekatan banyak-elektron sudah banyak dilaporkan, investigasi berdasarkan pendekatan satu-elektron pada dasarnya tidak mungkin kecuali untuk beberapa tingkat tenaga tertentu seperti $^4\text{T}_2$ dan ^2E . Di sini kita membandingkan energi transisi dari tingkat tenaga $^4\text{A}_2$ (keadaan dasar) ke tingkat tenaga $^4\text{T}_2$ (U-band) dan ke ^2E (R-line) dari rubi yang diestimasi dengan pendekatan satu-elektron dan banyak-elektron berbasis *first-principles calculations*. Perhitungan satu-elektron dilakukan menggunakan metode diskrit variatif $\text{X}\alpha$ (DV- $\text{X}\alpha$) dikombinasikan dengan teori medan ligan, sementara perhitungan banyak-elektron dilakukan menggunakan metode multi-elektron variasional diskrit (DVME). Hasilnya menunjukkan bahwa formula halus untuk memperkirakan energi R-line berdasarkan pendekatan satu elektron diperlukan untuk meningkatkan kesepakatan dengan eksperimen.

Kata kunci: DV- $\text{X}\alpha$, DVME, *first-principles calculations*, $^4\text{T}_2$, ^2E

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah puji syukur kehadirat Allah SWT, penelitian dengan judul “Karakterisasi Spektral Logam Transisi Trivalen Kromium pada Senyawa Kristal Aluminium Oksida” ini dapat kami selesaikan karena dukungan dan kerjasama dari berbagai pihak. Oleh karena itu penulis menyampaikan terima kasih kepada :

1. Bapak Rektor Universitas PGRI Semarang yang telah memberikan kesempatan dan dukungan dana untuk pelaksanaan penelitian ini.
2. Bapak Ketua LPPM Universitas PGRI Semarang beserta tim reviewer yang telah mendukung kelancaran pelaksanaan penelitian ini.
3. Bapak Dekan Fakultas Teknik dan Informatika Universitas PGRI Semarang yang telah memberikan dukungan dalam penelitian ini.
4. Bapak Kaprodi Informatika Fakultas Teknik dan Informatika Universitas PGRI Semarang yang telah memberikan dukungan dalam kelancaran pelaksanaan penelitian ini.
5. Dan seluruh pihak yang telah membantu penelitian ini yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Semoga peneltian ini bermanfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan dan Teknologi, khususnya di Universitas PGRI Semarang.

Semarang, Desember 2018

Tim Peneliti

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	1
HALAMAN PENGESAHAN	Error! Bookmark not defined.
ABSTRAK.....	3
KATA PENGANTAR	4
DAFTAR ISI.....	5
BAB I PENDAHULUAN.....	6
1.1. Latar Belakang	6
1.2. Rumusan Permasalahan.....	7
1.3. Batasan Masalah.....	7
1.4. Tujuan Penelitian.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	8
2.1. Studi Literatur	8
2.2. Dasar Teori.....	9
BAB III METODE PENELITIAN	12
3.1. Obyek Penelitian	12
3.2. Bentuk Penelitian dan Metode Perhitungan	13
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	15
4.1. Hasil.....	15
4.2. Pembahasan	16
BAB V. PENUTUP	17
5.1. Kesimpulan	17
5.2. Saran	17
DAFTAR PUSTAKA	18
Lampiran 1. Riwayat Hidup Ketua dan Anggota Penelitian.....	21

BAB I PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Saat ini jumlah penduduk dunia sudah mencapai 7.6 M, dimana Indonesia adalah pnyumbang terbesar ke-4 setelah China, India dan Amerika Serikat [1]. Data terakhir menunjukkan bahwa jumlah penduduk kita saat ini berada di angka 267 juta jiwa [1]. Sementara idealnya, bumi ini hanya mampu menampung sekitar 3-4 M jiwa saja. Fakta membuktikan bahwa setiap hari ada lebih dari 41 ribu anak meninggal dunia. Jika diakumulasikan, setiap tahun ada lebih dari 15 juta anak-anak yang kehilangan nyawa karena kemiskinan kelaparan dan kesehatan yang buruk [2]. Data-data ini membuat dunia khawatir, karena adanya teori yang dikemukakan oleh Thomas Maltus pada tahun 1798 yang mengatakan bahwa pertumbuhan penduduk seperti deret ukur sedangkan pertumbuhan pangan seperti deret hitung [3]. Pemikiran ini menjelaskan bahwa pertumbuhan penduduk cenderung melampaui pertumbuhan pangan. Sedangkan pertumbuhan pangan akan selalu diikuti dengan meningkatnya kebutuhan energi.

Walau bagaimanapun, sumber energi tidak akan pernah cukup untuk memenuhi kebutuhan manusia. Dengan jumlah penduduk kita yang semakin meningkat butuh energi yang lebih banyak lagi. Saat ini saja kita sudah sangat bergantung dengan teknologi seperti smartphone, laptop, TV, dan lain sebagainya. Sehingga diperlukan sebuah solusi cerdas dalam menghadapi jaman yang terus berkembang, yaitu dengan mengubah secara drastis gaya hidup kita dan menerapkan teknologi modern. Menjadi tugas kita sebagai komponen bangsa untuk ikut berperan dalam upaya penghematan energi. Karena saat ini energi paling banyak digunakan adalah untuk penerangan, maka efisiensi energi untuk penerangan adalah jawabannya.

Light emitting diode (LED) adalah salah satu jenis lampu penerangan yang saat ini sedang dikembangkan. Meskipun disebut-sebut memiliki efisiensi yang tinggi dan waktu hidup yang panjang, lampu LED kekurangan komponen warna merah. Komponen tersebut salah satunya adalah fosfor merah yang dapat diperoleh dengan mengkombinasikan suatu logam transisi dengan senyawa kristal. Karena jumlah kombinasi logam transisi dan senyawa kristal tersebut terlalu banyak, eksperimen coba-coba pada pencarian fosfor merah membutuhkan waktu dan biaya yang tinggi. Oleh karena itu, simulasi komputer sangat diharapkan dapat memberikan informasi tentang karakteristik spektral suatu materi (panjang ikatan, spektra serapan, tingkat

energi, dll) dan untuk membantu menemukan kombinasi logam transisi dan senyawa kristal yang tepat.

Penelitian tentang fosfor merah dengan kombinasi logam transisi tetravalen mangan (Mn^{4+}) dan senyawa kristal kalium fluorosilikat (K_2SiF_6) telah banyak dilaporkan [4]. Meskipun memiliki kemampuan menghasilkan warna merah yang baik, materi berbasis fluorida ini tidak tahan terhadap panas dan kelembapan [5]. Sehingga, senyawa host kristal berbasis oksida, nitrida atau sulfida lebih diminati. Selain itu, untuk mengetahui aturan dalam pencarian kandidat fosfor merah untuk LED putih, penting untuk mempelajari secara menyeluruh ion-ion isoelektronik Mn^{4+} , seperti V^{2+} dan Cr^{3+} . Oleh sebab itu, dalam penelitian ini akan dipelajari logam transisi trivalen kromium (Cr^{3+}) yang diaktifkan pada senyawa kristal aluminium oksida ($\alpha-Al_2O_3$).

1.2. Rumusan Permasalahan

Berdasarkan uraian latar belakang di atas, maka fokus masalah yang dirumuskan dalam penelitian ini adalah bagaimana kecenderungan logam transisi yang diaktifkan pada senyawa kristal.

1.3. Batasan Masalah

Penelitian ini dilakukan pada logam transisi trivalen kromium (Cr^{3+}) dan senyawa kristal aluminium oksida ($\alpha-Al_2O_3$) yang selanjutnya akan disebut dengan $\alpha-Al_2O_3: Cr^{3+}$.

1.4. Tujuan Penelitian

Dari rumusan permasalahan di atas maka tujuan dari penelitian ini adalah menghitung karakteristik spektral energi orbital molekul dan energi multiplet $\alpha-Al_2O_3: Cr^{3+}$ dengan pendekatan satu-elektron dan banyak-elektron.

1.5. Manfaat Penelitian

Melalui penelitian ini diharapkan hasil dari penelitian akan memberikan manfaat menambah pengetahuan mengenai karakteristik spektral logam transisi $\alpha-Al_2O_3: Cr^{3+}$ dan mendapatkan suatu gambaran mengenai struktur elektronik, energi orbital molekul dan energi multipletnya.

BAB II TINJAUAN PUSTAKA

Pada bagian ini akan dijelaskan hasil studi literatur mengenai penelitian sebelumnya dan dasar teori yang dijadikan acuan atau landasan dalam penelitian ini. Dasar teori akan memberikan gambaran secara umum dari landasan penjabaran penelitian.

2.1. Studi Literatur

Dalam pencarian kandidat fosfor yang tepat untuk LED putih, diperlukan pemahaman menyeluruh tentang karakter dari masing-masing bahan. Hal ini karena pancaran cahaya yang dihasilkan dari material tersebut, baik warna maupun panjang gelombangnya, sangat dipengaruhi oleh beberapa faktor seperti struktur elektronik, energi pemisahan medan-kristal, spektra serapan, dan energi multipletnya. Untuk itu, berbagai macam pendekatan baik secara eksperimental maupun teoretis dapat digunakan.

Pada dasarnya, pendekatan eksperimental dan teoretikal tidak dapat dipisahkan satu sama-lain atau berdiri sendiri-sendiri. Biasanya, pendekatan eksperimental lebih sering digunakan karena merupakan tipe penelitian dasar yang relatif mudah dilakukan. Tetapi, pada studi pencarian material yang tepat untuk diaplikasikan pada teknologi penerangan, penggunaan pendekatan eksperimental kurang efisien. Hal ini karena eksperimen coba-coba memerlukan waktu dan biaya yang tidak murah. Human error juga merupakan pemegang kunci hasil yang benar.

Dalam bidang Ilmu Kimia terdapat suatu cabang ilmu yang menggunakan hasil kimia teori yang diterjemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya maupun melakukan simulasi terhadap sistem-sistem besar (makromolekul seperti protein atau sistem banyak molekul seperti gas, cairan, padatan, dan kristal), dan menerapkan program tersebut pada sistem kimia nyata. Kimia komputasi juga disebut kimia teori atau pemodelan molekular [6]. Komputasi memungkinkan pemodelan molekul untuk memprediksi apa yang akan terjadi di laboratorium, sehingga dapat mempersiapkan eksperimen dengan lebih baik dan lebih mengerti apa yang diamati. Dengan demikian, Kimia Komputasi dapat digunakan sebagai simulasi untuk melakukan eksperimen yang mungkin terlalu mahal atau sangat berbahaya jika dilakukan di laboratorium. Kimia

komputasi juga digunakan untuk memberikan informasi mengenai sifat-sifat molekul, struktur kimia atau untuk simulasi hasil eksperimen.

2.2. Dasar Teori

Teori medan kristal (Bahasa Inggris: *Crystal Field Theory*, disingkat CFT) adalah sebuah model yang menjelaskan struktur elektronik dari senyawa logam transisi yang semuanya dikategorikan sebagai kompleks koordinasi. CFT berhasil menjelaskan beberapa sifat-sifat magnetik, warna, entalpi hidrasi, dan struktur spinel senyawa kompleks dari logam transisi, namun ia tidak ditujukan untuk menjelaskan ikatan kimia. CFT dikembangkan oleh fisikawan yang bernama Hans Bethe dan John Hasbrouck van Vleck pada tahun 1930-an [7]. CFT pada akhirnya digabungkan dengan teori orbital molekul, membentuk teori medan ligan yang lebih akurat dan menjelaskan proses ikatan kimia pada senyawa kompleks logam transisi.

Menurut CFT, interaksi antara logam transisi dan ligan diakibatkan oleh tarikan antara kation logam yang bermuatan positif dan elektron bukan-ikatan ligan yang bermuatan negatif. Teori ini dikembangkan menurut perubahan energi dari lima degenerat orbital-d ketika dikelilingi oleh ligan-ligan. Ketika ligan mendekati ion logam, elektron dari ligan akan berdekatan dengan beberapa orbital-d logam dan menjauhi yang lainnya, menyebabkan hilangnya kedegeneratan (*degeneracy*). Elektron dari orbital-d dan dari ligan akan saling tolak menolak. Oleh karena itu, elektron-d yang berdekatan dengan ligan akan memiliki energi yang lebih besar dari yang berjauhan dengan ligan, menyebabkan pemisahan energi orbital-d. Pemisahan ini dipengaruhi oleh faktor-faktor seperti:

- a) Sifat-sifat ion logam.
- b) Keadaan oksidasi logam. Keadaan oksidasi yang lebih besar menyebabkan pemisahan yang lebih besar.
- c) Susunan ligan disekitar ion logam transisi.
- d) Sifat-sifat ligan yang mengelilingi ion logam. Efek ligan yang lebih kuat akan menyebabkan perbedaan energi yang lebih besar antara orbital 3d yang berenergi tinggi dengan yang berenergi rendah.

Teori medan ligan (Bahasa Inggris: *Ligand Field Theory*), disingkat LFT, adalah sebuah teori yang menjelaskan ikatan pada senyawa kompleks koordinasi [8]. Teori ini adalah modifikasi dari CFT yang merupakan aplikasi teori orbital molekul

pada kompleks logam transisi. Dalam formulasi asli LFT [9-11], hanya bidang kristal oktahedral (1 ion logam transisi dikelilingi 6 ion ligan) dengan simetri O_h yang dipertimbangkan. Untuk logam transisi yang memiliki konfigurasi 3d, terdapat dua kelompok orbital-3d yang disebut dengan t_{2g} dan e_g . Orbital t_{2g} terdegenerasi menjadi orbital d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} . Sedangkan orbital e_g terdegenerasi menjadi orbital d_{z^2} , $d_{x^2-y^2}$. Pemisahan energi antara orbital t_{2g} dan e_g biasanya disebut dengan pemisahan medan kristal (Bahasa Inggris: *crystal-field splitting*) dinotasikan dengan $10Dq$, dimana Dq adalah kekuatan medan kristal yang besarnya bervariasi tergantung pada kombinasi ion dan kristal.

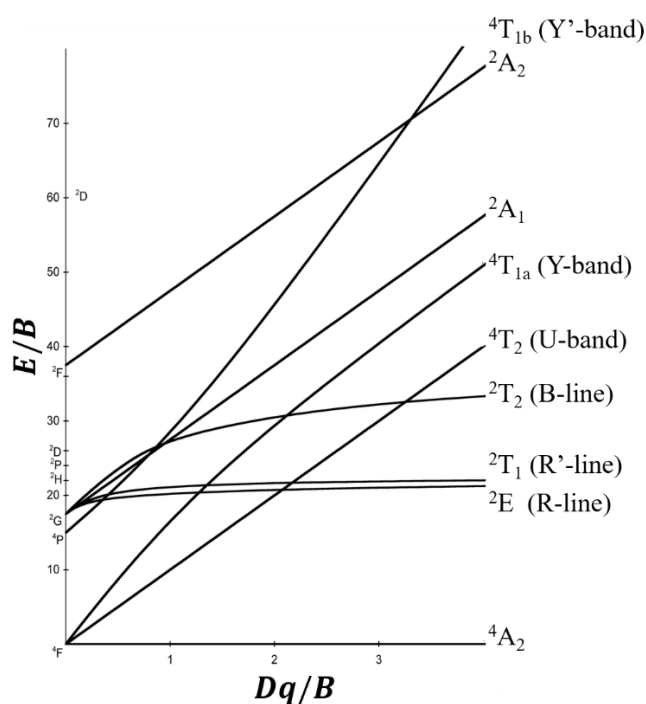
Pada simetri oktahedron, orbital t_{2g} akan memiliki energi $-4Dq$ yang lebih rendah daripada orbital e_g , $+6Dq$. Hal ini dikarenakan orbital d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} memiliki posisi yang lebih jauh dari ligan-ligan, sehingga mendapatkan gaya tolak yang lebih kecil. Akan tetapi, hal ini berbeda dengan kompleks tetrahedron. Pada simetri oktahedron, empat ligan membentuk tetrahedron disekitar ion logam transisi. Orbital t_{2g} akan memiliki energi yang lebih tinggi daripada orbital e_g . Hal ini dikarenakan elektron ligan pada simetri tetrahedral tidaklah berorientasi pada orbital-orbital d, sehingga pemisahan energi tetrahedral akan lebih kecil daripada pemisahan energi oktahedral.

Dalam teori LFT, keadaan kuantum ion pengotor / dopan dalam kristal biasanya disebut dengan "multiplet". Multiplet tersebut pada dasarnya didominasi oleh korelasi di antara elektron yang menempati orbital valensi yang terbuka. Multiplet didefinisikan sebagai sekelompok keadaan mekanika kuantum yang terkait satu sama lain dimana tingkatan energinya dapat dibagi menjadi sejumlah spesifik tingkat-tingkat energi yang berbeda.

Pada kasus senyawa yang dengan Mn^{4+} sebagai ion pengotornya, karena Mn^{4+} memiliki 3 elektron yang menempati 10 orbital 3d yang terdegenerasi (konfigurasi $3d^3$), terdapat beberapa tingkat energi yang doublet (terdegenerasi 2) dan kuartet (terdegenerasi 4). Tingkat energi doublet yaitu, 2E , 2T_1 , 2T_1 , dll, dan beberapa tingkat energi kuartet yaitu, 4A_2 , 4T_2 , ${}^4T_{1a}$, ${}^4T_{1b}$, dll. Tingkat energi 4A_2 adalah *ground state* yang memiliki energi paling rendah. Pada penggunaannya sebagai bahan fosfor merah, transisi dari tingkat energi 4A_2 ke 4T_2 (U-band) dan ke ${}^4T_{1a}$ (Y-band) digunakan untuk proses penyerapan, sementara transisi dari tingkat energi 2E ke 4A_2 (R-line) digunakan

untuk proses emisi. Multiplet-multiplet inilah yang mempengaruhi spektra serapan dan emisinya.

Yukito Tanabe dan Satoru Sugano pada tahun 1954 mempublikasikan artikel mereka dengan judul “*On the absorption spectra of ion complex*” [9-11]. Dari yang sebelumnya sedikit yang diketahui tentang keadaan elektronik terksitasi dari ion logam kompleks. Mereka menggunakan teori medan kristal Hans Bethe dan kombinasi linear Giulio Racah dari integral Slater [12,13], sekarang disebut parameter Racah, untuk menjelaskan spektrum serapan ion kompleks oktahedral dengan cara yang lebih kuantitatif daripada yang telah dicapai sebelumnya [9]. Efek kovalensi diperhitungkan melalui parameter repulsi elektron-elektron, A, B, dan C. Setelah melakukan banyak percobaan spektroskopi kemudian mereka memperkirakan nilai untuk dua parameter Racah, B dan C, untuk setiap konfigurasi d-elektron berdasarkan tren dalam spektrum absorpsi logam transisi baris pertama isoelektronik. Dalam artikel tersebut, mereka menggambarkan energi yang dihitung untuk masing-masing tingkat tenaga elektronik dari setiap konfigurasi elektron seperti d^2 , d^3 (Gambar 3), d^4 , d^5 , d^6 , d^7 , d^8 yang sekarang dikenal sebagai diagram Tanabe – Sugano [14]. Tingkat energi multiplet E_i dapat dinyatakan dalam hal kekuatan medan kristal Dq dan Racah parameter B dan C . E_i/B digambarkan sebagai fungsi Dq/B untuk nilai tetap C/B .



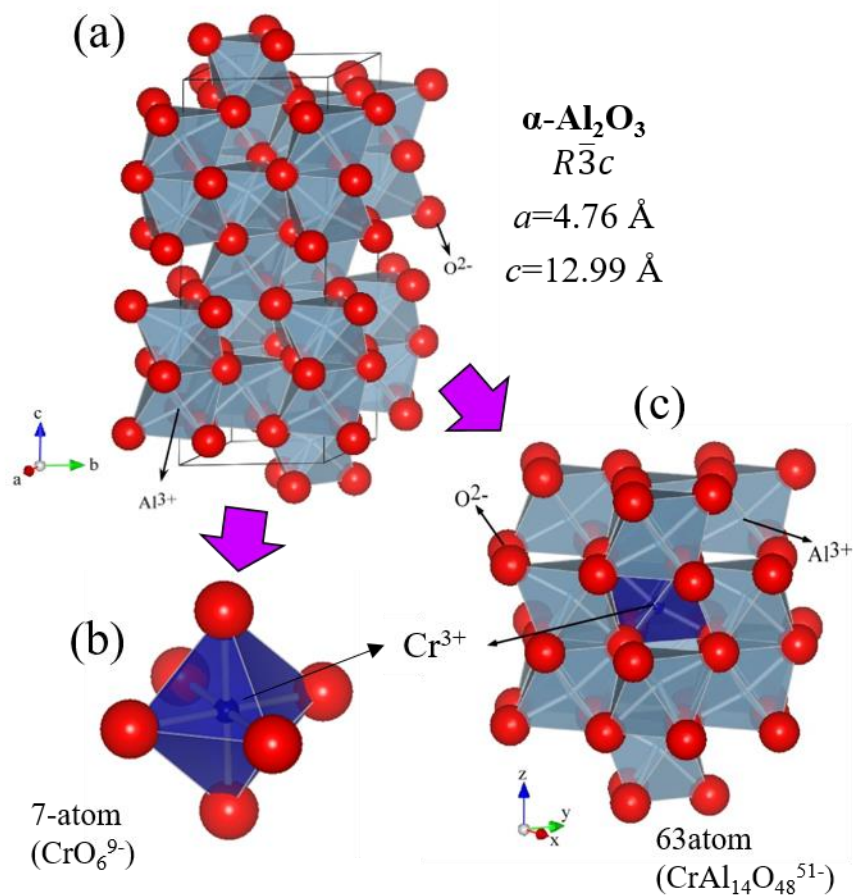
Gambar 1. Diagram Tanabe-Sugano [14] untuk logam transisi dengan konfigurasi elektron $3d^3$.

BAB III METODE PENELITIAN

Pada penelitian ini, metode yang akan digunakan adalah sebagai berikut

3.1. Obyek Penelitian

Obyek penelitian yang digunakan adalah logam transisi trivalen kromium (Cr^{3+}) dan senyawa kristal aluminium oksida ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$). $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ memiliki struktur rhombohedral A_2X_3 (grup ruang $R\bar{3}c$) dengan parameter kisi $a = 4.76 \text{ \AA}$ dan $c = 12.99 \text{ \AA}$ [15]. Dari struktur senyawa tersebut, 2 jenis model klaster yang terdiri dari 7-atom (CrO_6^{9-}) dan 63-atom ($\text{CrAl}_{14}\text{O}_{48}^{51-}$). Ilustrasi struktur atom $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ dan 2 jenis model klaster yang digunakan dalam penelitian ini ditunjukkan pada Gambar 2.



Gambar 2. Ilustrasi (a) struktur kristal $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ yang memiliki struktur rhombohedral A_2X_3 (grup ruang $R\bar{3}c$) dengan parameter kisi $a = 4.76 \text{ \AA}$ dan $c = 12.99 \text{ \AA}$ dan 2 jenis model klaster yang terdiri dari (b) 7-atom (CrO_6^{9-}) dan (c) 63-atom ($\text{CrAl}_{14}\text{O}_{48}^{51-}$).

3.2. Bentuk Penelitian dan Metode Perhitungan

Bentuk penelitian ini adalah penelitian deskriptif kuantitatif yang melibatkan simulasi komputer. Untuk mendapatkan data-data yang diperlukan penulis menggunakan beberapa metode penelitian sebagai berikut:

a. Studi Literatur

Merupakan teknik pengumpulan data dengan cara mempelajari referensi berupa dokumen/berkas dan mengumpulkan data, buku, jurnal penelitian, browsing internet yang berkaitan dengan penelitian dan studi pustaka.

b. Hipotesis Penelitian

Hipotesis yang diajukan dalam penelitian ini adalah ada hubungan antara yang signifikan antara struktur elektronik dengan energi orbital dan energi multiplet α -Al₂O₃: Cr³⁺.

c. Perhitungan energi orbital dan energi multiplet

Untuk mengetahui adanya hubungan antara struktur elektronik dengan energi orbital dan energi multiplet α -Al₂O₃: Cr³⁺, metode LFT akan digunakan. Karakterisasi ini penting dilakukan untuk mengetahui sifat spektral materi α -Al₂O₃: Cr³⁺ sebagai fosfor merah. Selain itu, perhitungan dengan menggunakan metode LFT diperlukan untuk menganalisa faktor/variabel yang mempengaruhi sifat spectral materi α -Al₂O₃: Cr³⁺ secara detail.

Pertama, model klaster α -Al₂O₃: Cr³⁺ yang terdiri dari 7- dan 63-atom sdiptimalisasi dengan mempertimbangkan efek relaksasi kisinya menggunakan software CASTEP [15]. Kedua, orbital molekul dihitung menggunakan metode DV-X α [16]. Dalam hal ini, untuk menghitung energi multiplet berdasarkan teori medan ligan, energi transisi ${}^4A_2 \rightarrow {}^4T_2$ atau yang disebut energi U-band ($\varepsilon({}^4T_2)$) dapat dihitung dengan energi transisi dari t_{2g} ke e_g (ΔE_U). Di sisi lain, energi transisi ${}^2E \rightarrow {}^4A_2$ atau yang disebut dengan energi R-line didefinisikan sebagai $\varepsilon_1({}^2E) = 4/5 \times \Delta E_R$, seperti yang dilaporkan oleh Ohnishi *et al.* [17]. Di sini, ΔE_R energi transisi spin-flip berdasarkan perhitungan satu-elektron dari spin $t_{2g}\uparrow$ ke spin $t_{2g}\downarrow$. Namun demikian, jika kita perhatikan lebih detail, Ohnishi-Sugano menginterpretasikan ΔE_R sebagai transisi dari tingkat tenaga quartet 4A_2 ke tingkat tenaga doublet 2E , 2T_1 , dan 2T_2 , yang mengacu pada transisi dari $s_Z=1/2$ ke $s_Z=-1/2$ pada skema satu-elektron. Namun demikian, transisi spin-flip sebenarnya terjadi dari $S_Z=3/2$ ke $S_Z=1/2$ pada skema banyak-elektron. Keadaan mula-mula $S_Z=3/2$ hanya terdiri dari 4A_2 , sementara

keadaan akhir $S_Z=1/2$ terdiri dari 2T_2 , 2T_1 , 2E , dan 4A_2 pada konfigurasi t_{2g}^3 . Karena mereka tergolong pada tingkat spin yang berbeda, transisi 4A_2 dari $S_Z=3/2$ ke 4A_2 dari $S_Z=1/2$ seharusnya juga diperhitungkan. Oleh karena itu, energi R-line seharusnya diestimasi dengan $\varepsilon_2({}^2E) = 9/10 \times \Delta E_R$. Kemudian untuk memperoleh energi ΔE_R dan ΔE_U , metode transisi Slater's [18] digunakan. Dalam hal ini, kami melakukan perhitungan polarisasi spin. Karena konfigurasi 3d didefinisikan dengan tingkat-tingkat tenaga ($t_{2g}\uparrow$), ($e_g\uparrow$), ($t_{2g}\downarrow$) dan ($e_g\downarrow$), energi ΔE_R dapat diperoleh dengan transisi dari ($t_{2g}\uparrow$) ke ($t_{2g}\downarrow$) sedangkan energi dari ΔE_U dapat diperoleh dengan transisi dari ($t_{2g}\uparrow$) ke ($e_g\uparrow$).

Ketiga, untuk menghitung energi multiplet dari rubi menggunakan pendekatan banyak-elektron, di sini kami menggunakan metode DVME. Langkah pertama metode DVME adalah perhitungan MO menggunakan metode DV-X α yang sudah dijelaskan sebelumnya. Setelah itu, perhitungan banyak-elektron menggunakan metode interaksi konfigurasi (Bahasa Inggris: *configuration interaction* disingkat CI) dilakukan. Biasanya energi multiplet yang dihasilkan pada tahap ini dinilai berlebihan [19], maka beberapa koreksi energi seperti *configuration-dependent correction* (CDC) dan *correlation correction* (CC) juga digunakan dalam penelitian ini. Koreksi energi tersebut merupakan sebuah konsistensi antara perhitungan banyak-elektron dan satu-elektron. Pada beberapa tahun terakhir, kami telah berhasil mempelajari energi transisi menggunakan metode ini [20-25]. Secara detail, prosedur metode DVME dijelaskan pada Ref 26.

BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1. Hasil

Hasil perhitungan energi R-line dan U-band menggunakan pendekatan satu-elektron dan banyak-elektron ditunjukkan pada Tabel 1 dan 2 secara berturut-turut. Hasil yang ditunjukkan pada Tabel 1 adalah hasil estimasi energi multiplet dihitung dengan kondisi komputasi yang berbeda seperti ukuran kluster model dan efek relaksasi kisi sebagai variabelnya. Di sisi lain, hasil yang ditunjukkan pada Tabel 2 tidak hanya perbedaan ukuran cluster dan efek relaksasi kisi yang dipertimbangkan dalam perhitungan, tetapi juga pertimbangan koreksi CDC-CC. Data eksperimen yang dilaporkan oleh Fairbank dkk. [28] ditampilkan pada baris paling atas sebagai perbandingan.

Tabel 1. Estimasi energi multiplet $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:Cr}^{3+}$ menggunakan pendekatan satu-elektron.

Ukuran kluster	Kondisi perhitungan	R-line (ΔE_R)		U-band (ΔE_U)
		$\varepsilon_1(^2E)$	$\varepsilon_2(^2E)$	
Experiment [28]		1.79		2.25
7-atom	Non-optimized	1.7469	1.9652	2.2284
	Optimized	1.7694	1.9906	2.0309
63-atom	Non-optimized	1.5611	1.7562	2.2664
	Optimized	1.5694	1.7656	1.6400

Tabel 2. Estimasi energi multiplet $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{:Cr}^{3+}$ menggunakan pendekatan banyak-elektron.

Ukuran kluster	Kondisi perhitungan	Tanpa CDC-CC		Dengan CDC-CC	
		R-line (eV)	U-band (eV)	R-line (eV)	U-band (eV)
Eksperimen [28]		1.79	2.25	1.79	2.25
7-atom	Non-optimized	2.3779	2.5376	2.0234	2.3548
	Optimized	2.3580	2.3907	2.0680	2.1442
63-atom	Non-	2.0603	2.6045	1.7745	2.3807

optimized				
Optimized	2.0700	2.3764	1.8559	2.1498

4.2. Pembahasan

Dalam proses optimasi geometri, panjang ikatan Cr-O diperkirakan 1,96 dan 2,01 Å. Hasil ini sangat sesuai dengan hasil *Extended X-Ray Absorption Fine Structure* (EXAFS) yang dilakukan oleh Kizler dkk. [27]. Panjang ikatan Cr-O yang diamati adalah 1,97 dan 2,00 Å. Hasil ini telah digunakan dalam makalah kami sebelumnya [20-21].

Hasil yang kami diperoleh dari pendekatan satu-elektron (Tabel 1) menunjukkan bahwa dibandingkan dengan data eksperimen, perhitungan energi R-line dengan menggunakan 7-atom model klaster $\varepsilon_1(^2E)$ memiliki kecocokan yang lebih baik daripada $\varepsilon_2(^2E)$. Namun, kecenderungan ini terbalik ketika kita menggunakan model klaster 63-atom. Di sisi lain, hasil dari energi U-band menunjukkan bahwa perhitungan sederhana berdasarkan pada kelompok model yang tidak dioptimalkan memiliki kecocokan yang lebih baik daripada model klaster yang dioptimalkan. Dalam kasus perhitungan banyak-elektron yang ditunjukkan pada Tabel 2, hasil perhitungan energi R-line dan U-band yang diperoleh dari kombinasi ukuran klaster yang lebih besar dan koreksi CDC-CC memberikan kecocokan yang baik dengan data eksperimen. Oleh karena itu, hal ini menunjukkan bahwa energi R-line yang diperoleh dari pendekatan satu-elektron menggunakan rumus $\varepsilon_2(^2E)$ memiliki kecocokan yang baik dengan data eksperimen.

BAB V. PENUTUP

5.1. Kesimpulan

Dari penelitian ini, dapat disimpulkan:

1. Kami telah berhasil menghitung multiplet energi rubi, yaitu, energi R-line dan U-band menggunakan pendekatan satu-elektron dan banyak-elektron.
2. Berdasarkan pendekatan banyak-elektron, perhitungan berdasarkan 63-atom model kluster baik yang tidak dioptimalkan atau yang dioptimalkan memberi kecocokan yang relatif baik dengan data eksperimen. Hasil ini mirip dengan yang diperoleh dengan pendekatan satu-elektron.
3. Meskipun sedikit lebih rendah dari data eksperimen, energi R-line yang dihitung berdasarkan 63-atom model kluster baik yang tidak-dioptimalkan atau yang dioptimalkan memberi kecocokan yang relatif baik dengan data eksperimen.
4. Karena energi U-band ($\varepsilon_2(^2E)$) yang dihitung berdasarkan pendekatan satu-elektron adalah perkiraan sederhana yang besarnya sama dengan $10Dq$, maka nilainya lebih rendah.

5.2. Saran

Saran untuk penelitian selanjutnya adalah agar memberikan perhatian khusus terutama pada tahap pembuatan kluster model. Hal ini karena kluster model menjadi titik awal yang sangat krusial dalam perhitungan energi multiplet baik menggunakan metode satu-elektron maupun banyak-elektron. Karena apabila kluster model yang dibuat tidak memiliki susunan seperti materi riilnya, maka akan meningkatkan error perhitungan.

DAFTAR PUSTAKA

- [1]. <http://www.worldometers.info/world-population/>
- [2]. <http://www.un.org/en/development/desa/population/publications/pdf/mortality/World-Mortality-2017-Data-Booklet.pdf>
- [3]. Malthus, T. R. (1798). An essay on the principle of population as it affects the future improvement of society, with remarks on the speculations of Mr. Goodwin, M.
- [4]. Setlur, A. A., Radkov, E. V., Henderson, C. S., Her, J. H., Srivastava, A. M., Karkada, N., ... & Kolodin, B. (2010). Energi-efficient, high-color-rendering LED lamps using oxyfluoride and fluoride phosphors. *Chemistry of Materials*, 22(13), 4076-4082.
- [5]. Ogasawara, K., Alluqmani, F., & Nagoshi, H. (2016). Multiplet Energi Level Diagrams for Cr³⁺ and Mn⁴⁺ in Oxides with Oh Site Symmetry Based on First-Principles Calculations. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 5(1), R3191-R3196.
- [6]. Chatfield, D. (2002). Christopher J. Cramer: Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. *Theoretical Chemistry Accounts: Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta)*, 108(6), 367-368.
- [7]. Van Vleck, J. H. (1932). Theory of the variations in paramagnetic anisotropy among different salts of the iron group. *Physical Review*, 41(2), 208.
- [8]. Schäfer, H. L., & Gliemann, G. (1969). Basic principles of ligand field theory. John Wiley & Sons.
- [9]. Tanabe, Y., & Sugano, S. (1954). On the absorption spectra of complex ions. I. *Journal of the Physical Society of Japan*. 9 (5): 753–766.
- [10]. Tanabe, Y., & Sugano, S. (1954). On the absorption spectra of complex ions II. *Journal of the Physical Society of Japan*, 9(5), 766-779.
- [11]. Tanabe, Y., & Sugano, S. (1956). On the absorption spectra of complex ions, III the calculation of the crystalline field strength. *Journal of the Physical Society of Japan*, 11(8), 864-877.
- [12]. Racah, G. (1942). Theory of complex spectra. I. *Physical Review*, 61(3-4), 186.

- [13]. Racah, G. (1942). Theory of complex spectra. II. *Physical Review*, 62(9-10), 438.
- [14]. Sugano, Y. T., & Kamimura, H. (1954). Multiplets of Transition-Metal Ions in Crystals (Academic, New York, 1970); Y. Tanabe and S. Sugano. *J. Phys. Soc. Jpn*, 9, 753.
- [15]. Clark, S. J., Segall, M. D., Pickard, C. J., Hasnip, P. J., Probert, M. I., Refson, K., & Payne, M. C. (2005). First principles methods using CASTEP. *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*, 220(5/6), 567-570.
- [16]. Adachi, H., Tsukuda, M., & Satoko, C. (1978). Discrete variational $X\alpha$ cluster calculations. I. Application to metal clusters. *Journal of the Physical Society of Japan*, 45(3), 875-883.
- [17]. Ohnishi, S., & Sugano, S. (1982). Theoretical studies of high-pressure effects on optical properties of ruby. *Japanese Journal of Applied Physics*, 21(5A), L309.
- [18]. Slater, J. C., & Phillips, J. C. (1974). Quantum theory of molecules and solids Vol. 4: The self-consistent field for molecules and solids. *Physics Today*, 27, 49.
- [19]. Cowan, R. D. (1981). *The theory of atomic structure and spectra* (No. 3). Univ of California Press.
- [20]. Novita, M., & Ogasawara, K. (2012). Comparative Study of Absorption Spectra of V^{2+} , Cr^{3+} , and Mn^{4+} in α - Al_2O_3 Based on First-Principles Configuration–Interaction Calculations. *Journal of the Physical Society of Japan*, 81(10), 104709.
- [21]. Novita, M., & Ogasawara, K. (2012). Comparative study of multiplet structures of Mn^{4+} in K_2SiF_6 , K_2GeF_6 , and K_2TiF_6 based on first-principles configuration–interaction calculations. *Japanese Journal of Applied Physics*, 51(2R), 022604.
- [22]. Novita, M., Honma, T., Hong, B., Ohishi, A., & Ogasawara, K. (2016). Study of multiplet structures of Mn^{4+} activated in fluoride crystals. *Journal of Luminescence*, 169, 594-600.
- [23]. Novita, M., Yoshida, H., & Ogasawara, K. (2013). Investigation of Ion Dependence of Electronic Structure for 3d3 Ions in Mg_2TiO_4 Based on First-Principles Calculations. *ECS Transactions*, 50(41), 9-17.

- [24]. Novita, M., & Ogasawara, K. (2014). Study on Multiplet Energies of V²⁺, Cr³⁺, and Mn⁴⁺ in MgO Host Crystal Based on First-Principles Calculations with Consideration of Lattice Relaxation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 83(12), 124707.
- [25]. Novita, M., Nagoshi, H., Sudo, A., & Ogasawara, K. (2018, January). Ab-initio study on the absorption spectrum of color change sapphire based on first-principles calculations with considering lattice relaxation-effect. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* (Vol. 299, No. 1, p. 012060). IOP Publishing.
- [26]. Ogasawara, K., Ishii, T., Tanaka, I., & Adachi, H. (2000). Calculation of multiplet structures of Cr³⁺ and V³⁺ in α -Al₂O₃ based on a hybrid method of density-functional theory and the configuration interaction. *Physical Review B*, 61(1), 143.
- [27]. Kizler, P., He, J., Clarke, D. R., & Kenway, P. R. (1996). Structural relaxation around substitutional Cr³⁺ ions in sapphire. *Journal of the American Ceramic Society*, 79(1), 3-11.
- [28]. Fairbank Jr, W. M., Klauminzer, G. K., & Schawlow, A. L. (1975). Excited-state absorption in ruby, emerald, and MgO: Cr³⁺. *Physical Review B*, 11(1), 60.

Lampiran 1. Riwayat Hidup Ketua dan Anggota Penelitian

1. Ketua Peneliti

A. Identitas Diri

1	Nama	:	Mega Novita, S.Si., M.Si., M.Nat.Sc., Ph.D
2	Jenis Kelamin	:	Perempuan
3	Jabatan Fungsional	:	Lektor
4	Jabatan Struktural	:	-
5	NIP/NPP	:	158801493
6	NIDN	:	0615118801
7	Tempat/tanggal Lahir	:	Salatiga, 15 November 1988
8	Alamat E-mail	:	novita@upgris.ac.id
9	Nomor Telp/HP	:	085867312111
10	Alamat Kantor	:	FT –UPGRIS, Jl. Sidodadi Timur 24 Semarang
11	Telp/Fax/E-mail	:	Tlp.0248316377/0248448217/upgrismg@yahoo.co.id
12	Lulusan yang dihasilkan	:	S1= 1 S2= ____
13	Mata Kuliah yang diampu	:	1. Kimia Dasar
			2. Fisika Dasar
			3. Fisika Lanjut
			4. Kalkulus Diferensial
			5. Kalkulus Integral
			6. Interaksi Manusia dan Komputer

B. Riwayat Pendidikan

	S1	S2	S3
Nama Perguruan Tinggi	Universitas Kristen Satya Wacana	Universitas Kristen Satya Wacana dan Kwansei Gakuin University, Jepang	Kwansei Gakuin University, Jepang
Bidang Ilmu	Matematika	(<i>Double Degree</i>) Biologi dan Kimia	Kimia
Tahun Masuk – Lulus	2005-2009	2009-2012	2012-2015
Judul Skripsi/Thesis/Disertasi	Study of Granger Causality between Exchange Rate to United State Dollar and Australian Dollar with Forecasting Using Vector	S-2 Biologi: Determination of <i>Rhodopseudomonas Palustris</i> Cell Biomass Based on Protein Spectra of NIR Spectroscopy. S-2 Kimia: First-Principles Electronic-	Theoretical Investigation on the Electronic Structures of Novel Red Phosphor Materials Based on Mn ⁴⁺ Ion and Its Isoelectronic

	Autoregression Analysis.	Structure Calculations of Mn ⁴⁺ -Doped Red Phosphors for White LED Application.	Ions.
Nama Pembimbing/ Promotor	1. Dr. Adi Setiawan 2. Dr. Didit Budi Nugroho	1. Prof. Ferdy S Rondonuwu 2. Dr. Jubhar Mangimbulude 3. Prof. Kazuyoshi Ogasawara	Prof. Kazuyoshi Ogasawara

C. Pengalaman Penelitian dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber	Jumlah (Juta Rp)
1.	2018	Studi Eksplorasi Green IT	Internal UPGRIS	7.5
2.	2018	Probiotik Limbah Ayam Broiler Dengan Feed Additive Herbal Dan Intermittent Lighting Untuk Menghasilkan Lele Sehat Konsumsi	Hibah Dosen Pemula Dikti PUPT	95
3.	2018	Rancang Bangun Soft Starter Pompa Satu Fasa Berbasis Pid Menggunakan Energi Matahari Untuk Rumah Tinggal	Hibah Bersaing Dikti PSNI	61

D. Pengalaman Pengabdian Masyarakat Dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Pengabdian Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber	Jumlah (Juta Rp)
1.	2016	(IbM) UKM Sahabat Tanjung di Desa Tanjungmojo Kecamatan Kangkung kabupaten Kendal	Internal UPGRIS	7.5
2.	2018	(PKM) “Taman Baca Digital Kelurahan Dopleng Kecamatan Bawen Kabupaten Semarang”	Internal UPGRIS	7.5
3.	2019	Diseminasi Teknologi Mesin Perajang Tembakau Dalam Upaya Menerapkan Ekoteknologi di Desa Tumbrasanom Kecamatan Kedungadaem Kabupaten Bojonegoro	Hibah PPTG DRPM	168

E. Publikasi Artikel Ilmiah dalam Jurnal

No	Judul Artikel Ilmiah	Nama Jurnal	Volume/Nomor/Tahun
1.	Comparative study of multiplet structures of Mn^{4+} in K_2SiF_6 , K_2GeF_6 , and K_2TiF_6 based on first-principles configuration-interaction calculations	Japanese Journal of Applied Physics	Volume 51 Tahun 2012 Halaman 022604
2.	Comparative Study of Absorption Spectra of V^{2+} , Cr^{3+} and Mn^{4+} in $\alpha-Al_2O_3$ Based on First-Principles Configuration-Interaction Calculations	Journal of Physical Society of Japan	Volume 81 Tahun 2012 Halaman 104709
3.	Investigation of Ion Dependence of Electronic Structure for $3d^3$ Ions in $MgTiO_4$ Based on First-Principles Configuration-Interaction Calculations	ECS Transaction	Volume 50 Tahun 2013 Halaman 9-17
4.	Study on Multiplet Energies of V^{2+} , Cr^{3+} , and Mn^{4+} in MgO Host Crystal Based on First-Principles Calculations with Consideration of Lattice Relaxation	Journal of Physical Society of Japan	Volume 83 Tahun 2014 Halaman 124707
5.	Study of multiplet structures of Mn^{4+} activated in fluoride crystals	Journal of Luminescence	Volume 169 Tahun 2016 Halaman 596
6.	Ab-initio study on the absorption spectrum of color change sapphire based on first-principles calculations with considering lattice relaxation-effect	IOP Conference Series: Materials Science and Engineering	Volume 299 Tahun 2017 Halaman 012060
7.	First-principles calculation of multiplet structures of Mn^{4+} in K_2SiF_6 , K_2GeF_6 , and K_2TiF_6	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 24	ISBN 1346-5015 Tahun 2011 Halaman 187-190
8.	Investigation of Ion Dependence of Optical Spectra for Isoelectronic $3d^3$ ions in $\alpha-Al_2O_3$	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 25	ISBN 1346-5015 Tahun 2012 Halaman 157-159
9.	Dependence of Optical Transition of d^3 Ions on Pressure	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 26	ISBN 1346-5015 Tahun 2013 Halaman 162-165
10.	Comparative Study of $4f-5d$ Transition Spectra of Ce^{3+} in	Bulletin of the Society for	ISBN 1346-5015 Tahun 2013

	Silicate Garnets	Discrete Variational X α 26	Halaman 145-147
11.	Nonempirical Energi Level Diagrams for d^3 ions in Oxides Considering Correlation Corrections	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 26	ISBN 1346-5015 Tahun 2013 Halaman 159-161
12.	Effects of charge transfer on the centroid shift of the $4f$ - $5d$ transition of Ce^{3+} in oxides and fluorides	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 27	ISBN 1346-5015 Tahun 2014 Halaman 83-86
13.	Multiplet energi level diagrams for d^3 ions under D_{3d} symmetry in Oxides	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 27	ISBN 1346-5015 Tahun 2014 Halaman 90-93
14.	Effects of Bond Lengths on the Optical Properties of Mn^{4+} in A_2BF_6 -type Crystals	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 27	ISBN 1346-5015 Tahun 2014 Halaman 110-115
15.	First-Principles Calculation of $4f^n - 4f^{n-1}5d$ Transition Energi of Trivalent Lanthanides Ions in CaF_2	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 29	ISBN 1346-5015 Tahun 2016 Halaman 152-155
16.	Calculation of Multiplet Energies of Ruby Under Pressure Based on One-Electron DV-X α Approach	Bulletin of the Society for Discrete Variational X α 30	ISBN 1346-5015 Tahun 2017 Halaman <i>In Press</i>

F. Pemakalah Seminar Ilmiah

No	Nama Pertemuan Ilmiah/Seminar	Judul Artikel Ilmiah	Waktu dan Tempat
1.	The 2011 Symposium on Coordination Compounds as Molecular Magnetic Materials	Calculation of Mn^{4+} -doped Red Phosphor K_2MF_6 (M=Si, Ge, Ti) for white LED	8 October 2011, Department of Chemistry of Kwansai Gakuin University, Japan.
2.	The 14 th International Density Functional Theory Conference	Comparative Study of Mn^{4+} doped Red Phosphors K_2MF_6 : Mn^{4+} (M=Si, Ge, Ti) Based on First-Principles Calculation	29 August – 2 September 2011, Demokritos, Athens, Greece.
3.	The 2012 Symposium on Coordination Compounds as Molecular Magnetic Materials	$3d^3$ ions in Mg_2TiO_4 as red phosphor for white LED	6 October 2012, Department of Chemistry of Kwansai Gakuin University, Japan
4.	The Pacific Rim	Investigation of Ion	7-12 October

	Meeting (PRiME),	Dependence of Electronic Structure for $3d^3$ ions in Mg_2TiO_4 Based on First-Principles Calculation	2012, Honolulu, Hawaii, United States of America.
5.	The 224 th ECS Meeting, The Electrochemical Society USA	Prediction of Pressure Dependence of R-line Emission for d^3 Ions in $\alpha-Al_2O_3$ Based on First-Principles Calculations	27 October – 1 November 2013, San Francisco, United States of America.
	The 2013 Symposium on Coordination Compounds as Molecular Magnetic Materials	Pressure Dependence on Multiplet Energies of d^3 Ions in $\alpha-Al_2O_3$	12 October 2013, Department of Chemistry of Kwansai Gakuin University, Japan.
6.	The 2014 International Conference on Luminescence	First-Principles Study of Multiplet Structures of Mn^{4+} In Fluoride Crystals	13-18 July 2014, University of Wroclaw, Wroclaw, Poland.
7.	The 2014 Symposium on Coordination Compounds as Molecular Magnetic Materials	Effects of Lattice Relaxation on Multiplet Energies of $A_2BF_6: Mn^{4+}$	11 October 2014, Department of Chemistry of Kwansai Gakuin University, Japan.
8.	The 230 th ECS Meeting, The Electrochemical Society USA	First-Principles Calculation on the Emission Energy Level of Ruby Based on DV- $X\alpha$ Molecular Orbital Method and Ligand Field Theory	2-7 October, 2016, Honolulu, Hawaii, United State of America.
9.	Science and Engineering national Seminar (SENS) 2	Investigation on the Excitation and Emission Energies of Ruby Based on One-Electron and many-Electron Quantum Mechanical Calculations	15 October 2016, Fakultas Teknik, Universitas PGRI Semarang, Indonesia.

G. Nara Sumber

No	Jenis Kegiatan	Tempat	Tahun
1.	The General lecture of 'Recent Development in Mathematics and Its Application' dengan judul presentasi "First-Principles Electronic-Structure Calculations of Mn^{4+} -Doped Red Phosphors for White LED Application"	Faculty of Science and Mathematics, Satya Wacana Christian University Salatiga, Indonesia.	2 April 2012
2.	The 26 th Annual Meeting of The Society for DV- $X\alpha$ Japan	Ryukoku University, Kyoto, Japan.	8 Agustus 2013
3.	Science and Engineering national	Fakultas Teknik,	15

	Seminar (SENS) 2	Universitas PGRI Semarang, Indonesia.	Oktober 2016
4.	Dies Natalis Universitas PGRI Semarang ke-37	Balairung Universitas PGRI Semarang, Indonesia.	23 Juli 2018

H. Pelatihan (Workshop)

No	Judul	Tahun	Tempat	Penyelenggara
1.	Workshop Pengusulan Jabatan Fungsional Dosen Online Bagi Dosen Perguruan Tinggi Swasta Kopertis Wilayah VI Jawa Tengah Angkatan VII Tahun 2017	9 Mei 2017	Hotel Aston Semarang	Kopertis Wilayah VI Jawa Tengah
2.	Workshop Peningkatan Kulaitas Output Penelitian	22-23 Februari 2018	Hotel Santika Premiere Semarang	Kopertis Wilayah VI Jawa Tengah
3.	Workshop Penyelenggaraan Seminar International	16-18 Mei 2018	Hotel Grand Tjokro Bandung	UPI Bandung

I. Penghargaan

No	Jenis Penghargaan	Institusi Pemberi Penghargaan	Tahun
1.	THE BEST GRADUATE AWARD of the 1 st period of 2011-2012 Graduation Ceremony	Satya Wacana Christian University.	16 Juli 2011.
2.	THE BEST POSTER PRESENTATION AWARD	The DV-X α society, Japan.	8 Agustus 2012.
3.	YOUNG SCIENTIST AWARD	The DV-X α society, Japan.	8 Agustus 2013.
4.	NITTA KINEN (FEMALE SCIENTIST) AWARD	School of Science and Technology, Kwansai Gakuin University, Japan.	Januari 2014.

		Gakuin University, Japan.	
6.	Perempuan Peraih Gelar Doktor Ilmu Kimia Termuda, 26 Tahun 4 Bulan	INDONESIAN RECORD MUSEUM (MURI)	10 Oktober 2016.
7.	Elsevier Reviewer Recognition	Computational Condensed Matter, Elsevier	Mei 2018
8.	Dosen dengan publikasi internasional bereputasi dan citasi terbanyak	Universitas PGRI Semarang	23 Juli 2018

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila dikemudian hari ternyata dijumpai ketidaksesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi. Demikian biodata ini saya buat dengan sebenarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Proposal Penelitian ini.

Semarang, 4 Desember 2018



Mega Novita, M.Nat.Sc., Ph.D.
NIP. 158801493

2. Anggota Peneliti 1

A. Identitas Diri

1	Nama lengkap (dengan gelar)	Setyoningsih Wibowo, ST, M. Kom
2	Jabatan fungsional	Asisten Ahli/IIIB
3	Jabatan struktural	-
4	NPP	137501389
5	NIDN	0623127501
6	Tempat dan Tanggal Lahir	Semarang, 23 Desember 1975
7	Alamat rumah	Jl. Jembawan II No. 4 Kalibanteng Kulon Semarang Barat
8	Nomor Telepon/Fax/ Hp	081325238381
9	Alamat Kantor	Jl. Sidodadi Timur (Dr. Cipto) no.24 Semarang
10	Nomor Telepon/ Fax	(024) 8316377 / (024) 8448217
11	Alamat e-mail	ninink.1623@gmail.com
12	Lulusan yang telah dihasilkan	S-1= orang, S-2= orang, S-3= orang
13.	Mata Kuliah Yang Diampu	<ol style="list-style-type: none"> 1. Logika Informatika 2. Pengantar Informatika 3. Komunikasi Data 4. Elektronika Digital

B. Riwayat Pendidikan

	S-1	S-2
Nama Perguruan Tinggi	UNDIP	UDINUS
Bidang Ilmu	Teknik Elektro	Teknik Informatika
Tahun Masuk-Lulus	1998 - 2001	2011 -2013
Judul Skripsi/Thesis/Disertasi	Pencegah Pencurian Pulsa pada Pesawat Telepon	Penerapan Algoritma Genetika Untuk Pemilihan Fitur Pada Prediksi Loyalitas Pelanggan Dengan Menggunakan <i>Neural Network</i>
Nama Pembimbingan/Promotor	<ol style="list-style-type: none"> 1. Ir. Yuning 2. Maman Sumantri, ST 	<ol style="list-style-type: none"> a. Dr. –Ing. Vincent Suhartono b. Romi Satria Wahono, M. Eng

C. Pengalaman Penelitian Dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)
1	2014	Perangkat Keras Kendali Port I/O Via Web tahun 2014, biaya LPPM Univ PGRI Semarang	LPPM Universitas PGRI Semarang	8,1

2	2015	Pemodelan Sistem Pengambilan Keputusan Untuk Pemilihan Putra Putri Kampus Universitas PGRI Semarang	LPPM Universitas PGRI Semarang	4,5
3	2016	Pembuatan Pangkalan Data Elektronik Kelurahan Muktiharjo Kidul Pedurungan Semarang	LPPM Universitas PGRI Semarang	4,5
4	2017	Analisis Dan Penerapan Algoritma C45 Dalam Data Mining Untuk Menunjang Strategi Promosi	LPPM Universitas PGRI Semarang	4,5

D. Pengalaman Pengabdian Kepada Masyarakat Dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Pengabdian kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)
1	2014	IbM Posdaya Kusuma Jaya Kota Semarang (Febrian M. Dewanto, Setyoningsih Wibowo , Khoiriya Latifa, Aris Tri Jaka H, Bambang Agus Herlambang)	LPPM Univ.PGRI Semarang	6.25
2	2015	IbM Paguyuban Pemuda "CAGAR Seno" Dukuh Cendono Kidul Desa Tembok Kec. Limpung Kab. Batang (Febrian M. Dewanto, Setyoningsih Wibowo , Khoiriya Latifa, Aris Tri Jaka H, Bambang Agus Herlambang)	LPPM Univ.PGRI Semarang	6.25
3	2016	IbM E-Commerce Komunitas Pusat Informasi Kesehatan Reproduksi Remaja (PIKRR) Kota Semarang (Febrian M. Dewanto, Setyoningsih Wibowo , Khoiriya Latifa, Aris Tri Jaka H, Bambang Agus Herlambang)	LPPM Univ.PGRI Semarang	6.25

E. Pengalaman Penulisan Artikel Ilmiah Dalam Jurnal Dalam 5 Tahun Terakhir

No	Judul Artikel Ilmiah	Volume/ Nomor/ Tahun	Nama Jurnal
1	Penerapan <i>Neural Network</i> Untuk Prediksi <i>Churn</i> Pada Perusahaan Telekomunikasi	ISSN: 2302-268X, 2012	Journal of Intelligent Systems and Bussiness Intelligence
2	<i>Image Enhamchement</i> Pada Deteksi Teks Dengan Menggunakan <i>Median Filter</i>	ISSN: 2302-268X, 2012	Journal of Intelligent Systems and Bussiness

			Intelligence
3	Aplikasi <i>Adaptive Tresholding</i> Untuk Deteksi Tepi Citra	ISSN: 2302-268X, 2012	Journal of Intelligent Systems and Bussiness Intelligence
4	<i>Neural Network</i> Dengan Algoritma Genetika Sebagai Pemilihan Fitur Pada Prediksi Loyalitas Pelanggan	Vol. XXI No. 2 Edisi Oktober 2014	Majalah Ilmiah Pawiyatan
5	Penerapan Logika Fuzzy Dalam Penjadwalan Mata Kuliah	Vol. 1 No. 1 Edisi Juni 2015	Jurnal Informatika UPGRIS (JIU)
6	Pengukuran Kualitas Layanan Sistem Informasi Akademik Menggunakan Metode <i>Webqual 4.0</i>	Vol. 1 No. 2 Edisi Desember 2015	Jurnal Informatika UPGRIS (JIU)
7	Pembuatan Pangkalan Data Elektronik Kelurahan Muktiharjo Kidul Pedurungan Semarang	Vol. 2 No. 1 Juni Tahun 2016	Jurnal Informatika UPGRIS (JIU)
8	Data Mining dalam Kajian Kualitas Aspal Beton Menggunakan <i>Forward Selection</i> Berbasis <i>Naïve Bayes</i>	Vol. 3 No. 1 Juni Tahun 2017	Jurnal Informatika UPGRIS (JIU)
9	Fitur Seleksi <i>Forward Selection</i> Untuk Menentukan Atribut Yang Berpengaruh Pada Klasifikasi Kelulusan Mahasiswa Fakultas Ilmu Komputer UNAKI Semarang Menggunakan Algoritma <i>Naive Bayes</i>	Vol. 3 No. 1 Juni Tahun 2017	Jurnal Informatika UPGRIS (JIU)

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila di kemudian hari ternyata dijumpai ketidak- sesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi. Demikian biodata ini saya buat dengan sebenarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Proposal Penelitian ini.

Semarang, 4 Desember 2018



Setyoningsih Wibowo, ST. M.Kom
NIP. 137501389

3. Anggota Peneliti 2

A. Identitas Diri

1	Nama lengkap (dengan gelar)	Noora Qotrun Nada, S.T., M.Eng.
2	Jabatan fungsional	Tenaga Pengajar
3	Jabatan struktural	-
4	NPP	158201485
5	NIDN	0626028201
6	Tempat dan Tanggal Lahir	Pekalongan, 26 Februari 1982
7	Alamat rumah	Jl. Lamongan Barat XII no.5 Kel. Sampangan Kec. Gajah Mungkur Semarang
8	Nomor Telepon/Fax/ Hp	081328522082
9	Alamat Kantor	Jl. Sidodadi Timur (Dr. Cipto) no.24 Semarang
10	Nomor Telepon/ Fax	(024) 8316377 / (024) 8448217
11	Alamat e-mail	noora.qn@gmail.com
12	Lulusan yang telah dihasilkan	S-1= orang, S-2= orang, S-3= orang
13.	Mata Kuliah Yang Diampu	1. Sistem Operasi 2. Komunikasi Data 3. Logika Informatika

B. Riwayat Pendidikan

	S-1	S-2
Nama Perguruan Tinggi	STT Telkom Bandung	Universitas Gadjah Mada
Bidang Ilmu	Teknik Elektro	Teknologi Informasi
Tahun Masuk-Lulus	1999 - 2004	2009 - 2013
Judul Skripsi/Thesis/Disertasi	Analisa Konsentrasi Ion Erbium pada Erbium Doped Fiber Amplifier (EDF)	Analisis Penerimaan Teknologi IPTV (Studi Kasus Groovia TV di Kota Semarang)
Nama Pembimbingan/Promotor	1. Akhmad Hambali, Ir., MT 2. Suwandi, Drs., M.Si	1. Dr. Ir. Eko Nugroho, M.Si 2. Bimo Sunarfrihantono, ST., M. Eng

C. Pengalaman Penelitian Dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)
1	2016	Pembuatan Pangkalan Data Elektronik Kelurahan Muktiharjo Kidul Pedurungan Semarang	LPPM Universitas PGRI Semarang	4,5
2	2017	Analisis Dan Penerapan Algorithma C45 Dalam Data Mining Untuk Menunjang Strategi Promosi	LPPM Universitas PGRI	4,5

			Semarang	
--	--	--	----------	--

D. Pengalaman Pengabdian Kepada Masyarakat Dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Pengabdian kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)
1	2015	IbM Paguyuban Pemuda "CAGAR Seno" Dukuh Cendono Kidul Desa Tembok Kec. Limpung Kab. Batang (Febrian M. Dewanto, Setyoningsih Wibowo, Khoiriya Latifa, Aris Tri Jaka H, Bambang Agus Herlambang, Noora Qotrun Nada)	LPPM Univ.PGRI Semarang	6.25
2	2016	IbM E-Commerce Komunitas Pusat Informasi Kesehatan Reproduksi Remaja (PIKRR) Kota Semarang (Febrian M. Dewanto, Setyoningsih Wibowo, Khoiriya Latifa, Aris Tri Jaka H, Bambang Agus Herlambang, Noora Qotrun Nada)	LPPM Univ.PGRI Semarang	6.25

E. Pengalaman Penulisan Artikel Ilmiah Dalam Jurnal Dalam 5 Tahun Terakhir

No	Judul Artikel Ilmiah	Volume/ Nomor/ Tahun	Nama Jurnal
1	Pengukuran Kualitas Layanan Sistem Informasi Akademik Menggunakan Metode Webqual 4.0	Vol. 1 No. 2 Edisi Desember 2015	Jurnal Informatika UPGRIS (JIU)
2	Pembuatan Pangkalan Data Elektronik Kelurahan Muktiharjo Kidul Pedurungan Semarang	Vol. 2 No. 1 Juni Tahun 2016	Jurnal Informatika UPGRIS (JIU)

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila di kemudian hari ternyata dijumpai ketidak- sesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi. Demikian biodata ini saya buat dengan sebenarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Proposal Penelitian ini.

Semarang, 4 Desember 2018



Noora Qotrun Nada, ST., M. Eng
NIP. 158201485



LEMBAGA PENELITIAN DAN PENGABDIAN KEPADA MASYARAKAT
UNIVERSITAS PGRI SEMARANG

Jl. Dr. Cipto - Lontar No. 1 Semarang - Indonesia Telp. (024) 8451279, 8451824 Faks. 8451279
Email : lppmupgrismg@gmail.com Website : lppm.upgris.ac.id

SURAT TUGAS

Nomor : 0276/ST/LPPM-UPGRIS/IX/2018

Dengan ini Ketua LPPM Universitas PGRI Semarang memberi tugas kepada :

Nama : Mega Novita, S.Si., M.Si., M.Nat. Sc., Ph.D.
NPP : 158801493
Pangkat/Golongan : Penata / III c
Jabatan Fungsional : Lektor
Pekerjaan : Dosen FT Universitas PGRI Semarang
Pada hari / tgl : September s.d. November 2018
Tempat : UPGRIS
Keperluan : Kegiatan Penelitian dengan judul Karakterisasi Spektral Logam Transisi Trivalen Kromium pada Senyawa Kristal Aluminium Oksida

Demikian agar tugas ini dilaksanakan dengan sebaik-baiknya dan setelah selesai harap melaporkan hasilnya.

Mengetahui,
Telah melaksanakan tugas



Semarang, 27 September 2018
Pit. Ketua LPPM,



LP **Dr. Basiman, M.Pd.**
NIP. 195602181986031001



**LEMBAGA PENELITIAN DAN PENGABDIAN KEPADA MASYARAKAT
UNIVERSITAS PGRI SEMARANG**

Jl. Dr. Cipto - Lontar No. 1 Semarang - Indonesia Telp. (024) 8451279, 8451824 Faks. 8451279
Email : lppmupgrismg@gmail.com Website : lppm.upgris.ac.id

SURAT TUGAS

Nomor : 0276/ST/LPPM-UPGRIS/IX/2018

Dengan ini Ketua LPPM Universitas PGRI Semarang memberi tugas kepada :

Nama : Setyoningsih Wibowo, S.T., M.Kom.
NPP : 137501389
Pangkat/Golongan : Penata muda Tk.I/ III b
Jabatan Fungsional : Asisten Ahli
Pekerjaan : Dosen FT Universitas PGRI Semarang
Pada hari / tgl : September s.d. November 2018
Tempat : UPGRIS
Keperluan : Kegiatan Penelitian dengan judul Karakterisasi Spektral Logam Transisi Trivalen Kromium pada Senyawa Kristal Aluminium Oksida

Demikian agar tugas ini dilaksanakan dengan sebaik-baiknya dan setelah selesai harap melaporkan hasilnya.

Mengetahui,
Telah melaksanakan tugas

Semarang, 27 September 2018
Plt. Ketua LPPM,

Dr. Rasman, M.Pd.
NIP. 195602181986031001



**LEMBAGA PENELITIAN DAN PENGABDIAN KEPADA MASYARAKAT
UNIVERSITAS PGRI SEMARANG**

Jl. Dr. Cipto - Lontar No. 1 Semarang - Indonesia Telp. (024) 8451279, 8451824 Faks. 8451279
Email : lppmupgrismg@gmail.com Website : lppm.upgris.ac.id

SURAT TUGAS

Nomor : 0276/ST/LPPM-UPGRIS/IX/2018

Dengan ini Ketua LPPM Universitas PGRI Semarang memberi tugas kepada :

Nama : Noora Qotrun Nada, S.T., M.Eng.
NPP : 158201485
Pangkat/Golongan : Penata Muda Tk.I/ III b
Jabatan Fungsional : Asisten Ahli
Pekerjaan : Dosen FT Universitas PGRI Semarang
Pada hari / tgl : September s.d. November 2018
Tempat : UPGRIS
Keperluan : Kegiatan Penelitian dengan judul Karakterisasi Spektral Logam Transisi Trivalen Kromium pada Senyawa Kristal Aluminium Oksida

Demikian agar tugas ini dilaksanakan dengan sebaik-baiknya dan setelah selesai harap melaporkan hasilnya.

Mengetahui,
Telah melaksanakan tugas



Semarang, 27 September 2018
Ketua LPPM,

Dr. Basman, M.Pd.
NIP. 195602181986031001