

# PEMODELAN DAN SIMULASI KOMPUTER DALAM PENGEMBANGAN MATERIAL SAINS

Yayan Sunarya

KBK Kimia Material, Jurusan Pendidikan Kimia FPMIPA UPI

e-mail: [yayan\\_sunarya@upi.edu](mailto:yayan_sunarya@upi.edu)

## *Abstrak*

*Pengembangan model matematik yang solusinya diselesaikan secara simulasi dalam komputer sudah menjadi bagian tidak terpisahkan dari rancang-bangun material sains baik proses maupun produk sebagai upaya mengoptimasi kinerja material. Berbagai metode dan pendekatan simulasi baik yang berbasis klasik maupun kuantum dikembangkan guna menyederhanakan dan mempercepat proses simulasi model. Metode yang banyak diterapkan dalam simulasi komputer antara lain adalah metode Monte Carlo dan metode yang berbasis teori fungsional kerapatan (density functional theory, DFT) dengan berbagai pendekatannya. Metoda Monte Carlo adalah metoda numerik yang mengandalkan variasi bilangan random untuk menyelesaikan permasalahan stochastic dan deterministic tertentu, sedangkan DFT didasarkan pada fungsi gelombang yang menyatakan kerapatan muatan suatu cluster molekuler berikut antaraksinya.*

**Katakunci:** *Pemodelan, simulasi, Monte Carlo, DFT, material sains*