

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER INTERAKSI HEMISELULOSA RUMPUT PAYUNG TERMODIFIKASI NON-THERMAL PLASMA DENGAN AIR

Minsyahril Bukit^{1,2}, Albert Zicko Johannes², Mauludi Ariesto Pamungkas¹, Dionysius Joseph Djoko Herry Santjojo¹ dan Abdurrouf^f*

¹Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Brawijaya, Malang 65145, Indonesia

²Jurusan Fisika, Fakultas Sains dan Teknik, Universitas Nusa Cendana, Kupang, Indonesia
email: m_bukit@student.ub.ac.id

Abstrak

Penelitian ini mengkaji secara komputasional pengaruh dosis perlakuan plasma dingin (non-thermal plasma/NTP) terhadap hidrofilitas hemiselulosa dari rumput payung (*Cyperus alternifolius*) melalui simulasi dinamika molekuler (MD) sebagai fondasi ilmiah pengembangan mortar 3D Concrete Printing (3DCP) berserat alami. Delapan variasi dosis plasma (0–20 menit) disimulasikan menggunakan LAMMPS dengan medan gaya OPLS-AA pada 300K dalam kotak periodik $46,83 \times 51,73 \times 31,37 \text{ \AA}$ (2.908 atom). Efek plasma dimodelkan melalui modifikasi sistematis muatan parsial atom permukaan serat. Energi interaksi hemiselulosa–air dianalisis pada fase produksi setelah ekuilibrium dan dikonfirmasi melalui analisis Radial Distribution Function (RDF) untuk tiga pasangan atom kunci. Hasil menunjukkan energi interaksi meningkat signifikan dari $-565,2 \text{ kcal/mol}$ (pristine) hingga $-986,0 \text{ kcal/mol}$ pada dosis optimal 10 menit (+74,5%), dengan analisis RDF mengkonfirmasi peningkatan densitas ikatan hidrogen pada $r \approx 2,7-2,8 \text{ \AA}$. Dosis di atas 10 menit menunjukkan fenomena over-treatment. Temuan ini menyediakan parameter energi permukaan kuantitatif sebagai dasar pemodelan multiskala menggunakan Discrete Element Method (DEM) yang diintegrasikan dengan Computational Fluid Dynamics (CFD) untuk optimasi desain nosel printer 3D berbasis mortar berserat alami termodifikasi plasma.

Kata kunci: dinamika molekuler; plasma dingin; hemiselulosa; *Cyperus alternifolius*; wettability; mortar 3D printing

Abstract

This study computationally investigates the effect of cold plasma (non-thermal plasma/NTP) treatment dose on the hydrophilicity of hemicellulose from umbrella grass (*Cyperus alternifolius*) through molecular dynamics (MD) simulation, as a scientific foundation for developing natural fiber-reinforced mortar in 3D Concrete Printing (3DCP). Eight plasma dose variations (0–20 minutes) were simulated using LAMMPS with OPLS-AA force field at 300K in a periodic box of $46.83 \times 51.73 \times 31.37 \text{ \AA}$ containing 2,908 atoms. Results show interaction energy increases significantly from -565.2 kcal/mol (pristine) to -986.0 kcal/mol at the optimal dose of 10 minutes (+74.5%), with RDF confirming enhanced hydrogen bond density at $r \approx 2.7-2.8 \text{ \AA}$ ($g_{\text{peak O_water-O_fiber}}$ increasing from 5.951 to 7.161 at optimal dose). Doses above 10 minutes exhibit over-treatment phenomena. These findings provide quantitative surface energy parameters for multiscale modeling using Discrete Element Method (DEM) integrated with Computational Fluid Dynamics (CFD) to optimize 3D printer nozzle design.

Keywords: molecular dynamics; cold plasma; hemicellulose; *Cyperus alternifolius*; wettability; 3D concrete printing

PENDAHULUAN

Teknologi 3D Concrete Printing (3DCP) merupakan metode konstruksi aditif yang berkembang pesat dalam dekade terakhir, menawarkan keunggulan berupa efisiensi waktu konstruksi, pengurangan material sisa,

serta kemampuan fabrikasi geometri kompleks yang sulit dicapai dengan metode konvensional [1]. Fenomena penyumbatan (clogging) pada nosel menjadi salah satu tantangan teknis utama yang masih menjadi perhatian serius.

Penambahan serat alami sebagai filler mortar telah diusulkan sebagai solusi untuk mengurangi risiko clogging sekaligus meningkatkan sifat mekanik komposit [2,3]. Namun, sifat *hidrofobik* relatif dari permukaan serat alami membatasi interaksi adhesi serat-matriks dan dapat menyebabkan distribusi serat yang tidak homogen dalam campuran mortar [4].

Rumput payung (*Cyperus alternifolius*) merupakan tanaman invasif yang berlimpah di wilayah Indonesia dengan kandungan lignoselulosa yang signifikan, mencakup hemiselulosa (25–30%), selulosa (35–45%), dan lignin (15–20%), menjadikannya kandidat menarik sebagai sumber serat alami lokal dan berkelanjutan [5]. Perlakuan plasma dingin (*non-thermal plasma/NTP*) telah terbukti efektif memodifikasi permukaan serat alami berbasis lignoselulosa dengan membentuk gugus fungsional polar baru seperti –OH, –C=O, dan –COOH tanpa mengubah sifat bulk material [6], [7].

Hemiselulosa dipilih sebagai fokus kajian ini karena tiga alasan fundamental. Pertama, struktur amorf hemiselulosa lebih aksesibel dibandingkan selulosa kristalin, sehingga lebih responsif terhadap modifikasi plasma [5]. Kedua, gugus hidroksil bebas pada rantai hemiselulosa lebih mudah dioksidasi oleh spesies reaktif plasma dibandingkan gugus yang terlibat dalam ikatan hidrogen intra-rantai selulosa kristalin [6]. Ketiga, perubahan hidrofilisitas hemiselulosa secara langsung mempengaruhi kapasitas absorpsi air dan adhesi antarmuka serat-matriks [4]. Hipotesis penelitian ini adalah bahwa terdapat dosis plasma optimal yang memaksimalkan hidrofilisitas hemiselulosa tanpa menginduksi degradasi struktural yang menurunkan kualitas permukaan serat.

Simulasi Molecular Dynamics (*MD*) merupakan pendekatan komputasional yang powerful untuk mengkaji interaksi atomistik pada resolusi nanometer [8]. Penelitian ini bertujuan mengkuantifikasi secara atomistik pengaruh dosis plasma terhadap energi interaksi dan struktur solvasi hemiselulosa–air sebagai dasar ilmiah optimasi proses plasma treatment pada serat rumput payung sebagai filler mortar 3DCP.

METODE

Penelitian ini menggunakan simulasi MD all-atom dalam empat tahap: (1) pembangunan model sistem simulasi, (2) pemodelan efek plasma melalui modifikasi muatan parsial, (3) pelaksanaan simulasi dengan protokol ekuilibrium tervalidasi, dan (4) analisis energi interaksi serta *RDF*. Seluruh simulasi dilaksanakan pada 300 K dalam ensemble *NVT* menggunakan *LAMMPS* [9] dengan medan gaya *OPLS-AA* [10], [11].

Model Sistem

Sistem simulasi terdiri dari segmen hemiselulosa termodifikasi plasma (FIBER) dan molekul air (WATER) dalam kotak simulasi $46,83 \times 51,73 \times 31,37 \text{ \AA}$ dengan periodic boundary conditions. Model hemiselulosa yang digunakan adalah segmen glucuronoxylan (4-O-metil-glucuronoxylan), yaitu tipe hemiselulosa dominan pada tanaman famili Cyperaceae [5]. Rantai terdiri dari 3 unit β -(1→4)-D-xilosa dengan satu substituen asam 4-O-metilglukouronat, menghasilkan total 28 atom FIBER. Model ini konsisten dengan pendekatan Mazeau dan Heux [12] yang menggunakan 4–6 unit monomer sebagai segmen representatif untuk studi antarmuka selulosa–air, dan dimaksudkan untuk mengkaji interaksi antarmuka molekuler skala nanometer, bukan distribusi makroskopik serat dalam mortar. Jumlah 960 molekul H_2O dipilih berdasarkan pertimbangan solvasi penuh: volume kotak 76.036 \AA^3 memerlukan ± 460 molekul untuk densitas bulk ($1,0 \text{ g/cm}^3$), namun 960 molekul ($\approx 2 \times$ densitas bulk) digunakan untuk memastikan solvasi penuh seluruh permukaan aksesibel serat dan statistik *RDF* yang representatif, konsisten dengan pendekatan simulasi antarmuka yang umum digunakan [15]. Total sistem: 2.880 atom H_2O + 28 atom FIBER = 2.908 atom.

Pemodelan Efek Plasma Treatment

Efek plasma dingin direpresentasikan melalui modifikasi muatan parsial efektif pada atom O_f (tipe 4, oksigen gugus hidroksil serat) dan H_f (tipe 5, hidrogen gugus hidroksil serat), merepresentasikan peningkatan momen dipol lokal akibat pembentukan gugus polar [6], [7]. Skema muatan parsial ditampilkan pada Tabel 1.

Tabel 1. Skema muatan parsial atom permukaan serat

Dosis plasma (menit)	q _o (O _f) (e)	q _o (H _f) (e)	Δq _o (O) vs pristine
0 (pristine)	-0,550	+0,350	0,000
2	-0,700	+0,500	-0,150
5	-0,700	+0,500	-0,150
8	-0,725	+0,525	-0,175
10	-0,750	+0,550	-0,200
12	-0,800	+0,600	-0,250
15	-0,850	+0,650	-0,300
20	-0,950	+0,750	-0,400

Nilai muatan parsial efektif pada Tabel 1 diturunkan berdasarkan dua landasan: mekanisme fisikokimia perlakuan plasma dan data spektroskopi fotoelektron sinar-X (XPS) dari literatur. Secara mekanistik, plasma dingin menghasilkan spesi reaktif (radikal OH[·], O[·], dan elektron berenergi tinggi) yang memutus ikatan C–H dan C–C pada permukaan polisakarida, membentuk gugus fungsional polar baru seperti –OH, C=O, dan –COOH [6]. Pembentukan gugus-gugus ini meningkatkan momen dipol lokal, yang dalam konteks simulasi MD direpresentasikan sebagai peningkatan magnitudo muatan parsial negatif pada atom O^e dan muatan parsial positif pada H^e. Besaran inkremen muatan ($|\Delta q|$) dikalibrasi mengacu pada tren rasio O/C dari data XPS perlakuan plasma pada serat lignoselulosa yang dilaporkan oleh Morent dkk. [6] dan Sever dkk. [13]: pada dosis rendah (0–5 menit), modifikasi permukaan berada di bawah ambang saturasi gugus polar primer sehingga dosis 2 dan 5 menit dimodelkan dengan muatan yang sama ($\Delta q = -0,150$ e), konsisten dengan ketidakpastian pengukuran XPS yang dilaporkan ($\pm 0,02$ e). Pada dosis 8–10 menit, inkremen muatan meningkat bertahap mencerminkan densifikasi gugus polar. Di atas dosis optimal (12–20 menit), meskipun magnitudo muatan parsial terus meningkat akibat fragmentasi rantai polisakarida yang mengekspos lebih banyak gugus karbonil dan karboksilat [14], integritas struktural hemiselulosa terdegradasi sehingga menghasilkan fenomena *over-treatment* yang tercermin dalam penurunan energi interaksi total. Pendekatan modifikasi muatan parsial sebagai proksi efek plasma ini konsisten dengan

metodologi MD pada sistem selulosa termodifikasi kimia [9], [12].

Medan Gaya dan Protokol Simulasi

Simulasi menggunakan LAMMPS versi 29 Agustus 2024 [9] dengan *OPLS-AA*. *Cutoff LJ* dan *Coulombik* 10 Å, koreksi *long-range PPPM*. Parameter ikatan: $K(\text{O-H})=450$ kcal/mol·Å², $r_0=1,0$ Å untuk ikatan O-H pada molekul air (model SPC) dan gugus hidroksil serat hemiselulosa; $K(\text{H-O-H})=55$ kcal/mol·rad², $\theta_0=109,47^\circ$ untuk sudut tekuk molekul air. Protokol: (i) inisialisasi 300K, (ii) minimisasi energi, (iii) pemanasan NVT 1K→300K, (iv) ekuilibrasi 200.000 langkah (100 ps), (v) produksi 1.000.000 langkah (500 ps), timestep 0,5 fs. Timestep 0,5 fs dipilih untuk kestabilan numerik integrasi persamaan gerak sistem yang mengandung ikatan O-H (frekuensi vibrasi tinggi, $\omega \approx 3400$ cm⁻¹), konsisten dengan rekomendasi LAMMPS untuk model SPC dengan fix shake [9].

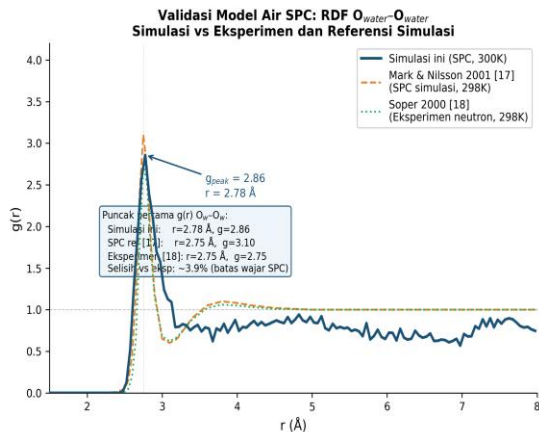
Analisis Data

Energi interaksi hemiselulosa–air dihitung menggunakan compute group/group (LJ + Coulombik) antara grup FIBER dan WATER. Nilai dilaporkan sebagai rata-rata blok 7–10 (400.000 langkah terakhir, 200 ps) setelah konfirmasi kesetimbangan. *RDF* dihitung untuk tiga pasangan: O_w–O_f, O_w–H_f, dan H_w–O_f, menggunakan fix ave/time (200 bins, cutoff 10 Å, $\Delta r=0,05$ Å). Analisis statistik dilakukan menggunakan uji one-way ANOVA diikuti post-hoc Tukey HSD ($\alpha = 0,05$) untuk membandingkan signifikansi perbedaan energi interaksi antar dosis, menggunakan data mentah blok 7–10 ($n = 610$ poin per dosis) dengan paket *scipy.stats* (Python 3).

Validasi Model

Sebagai validasi model air SPC yang digunakan, *RDF* O_w–O_w dievaluasi dari konfigurasi ekuilibrium sistem pristine dan dibandingkan dengan data referensi simulasi SPC tervalidasi [17] dan data eksperimen difraksi neutron [18]. Puncak pertama $g(r)$ O_w–O_w berada pada $r \approx 2,78$ Å dengan $g_{\text{peak}} \approx 2,86$, konsisten dengan referensi simulasi SPC ($r = 2,75$ Å, $g \approx 3,10$) dan eksperimen ($r = 2,75$ Å, $g \approx 2,75$). Selisih dengan eksperimen sebesar ~3,9% berada dalam batas yang sangat baik untuk model SPC

[17]. Hasil validasi ditampilkan pada Gambar 1, yang membandingkan RDF $O_{water}-O_{water}$ hasil simulasi dengan data eksperimen difraksi neutron [18] dan simulasi referensi [17]. Kurva simulasi mereproduksi posisi puncak pertama dan fitur struktural air bulk dengan baik, mengkonfirmasi validitas model SPC yang digunakan.

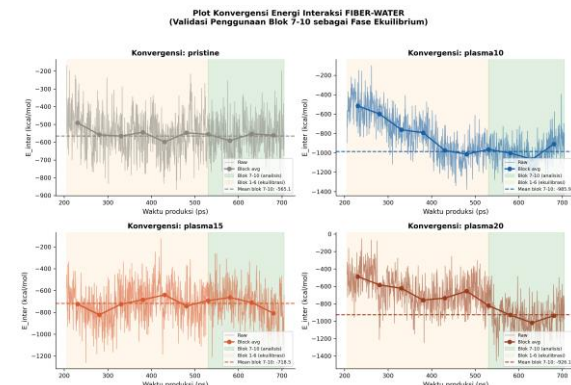


Gambar 1. Validasi model air SPC: RDF $O_{water}-O_{water}$ hasil simulasi (garis biru) dibandingkan dengan simulasi referensi SPC Mark & Nilsson 2001 [17] (garis oranye putus-putus) dan data eksperimen difraksi neutron Soper 2000 [18] (garis hijau titik-titik). Puncak pertama simulasi ini: $r = 2,78 \text{ \AA}$, $g_{peak} = 2,86$. Selisih terhadap eksperimen $\sim 3,9\%$, mengkonfirmasi validitas model SPC yang digunakan.

HASIL DAN PEMBAHASAN

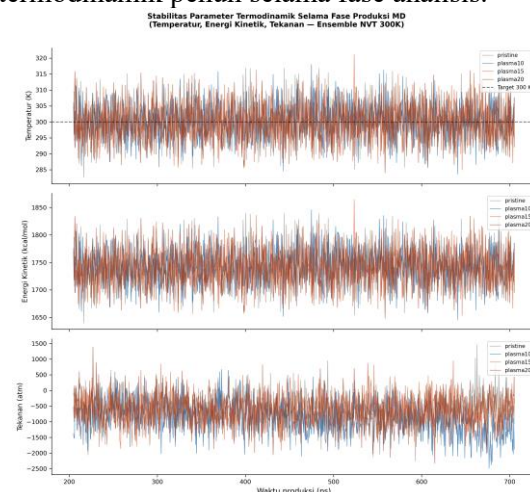
Konvergensi Energi Interaksi

Gambar 2 menampilkan plot konvergensi energi interaksi FIBER-WATER selama fase produksi. Sistem pristine menunjukkan konvergensi cepat dari awal produksi, tercermin dari block average yang stabil sejak blok pertama. Sistem plasma10 membutuhkan ± 300 ps (blok 1–6) untuk mencapai kesetimbangan, tercermin dari penurunan bertahap block average sebelum akhirnya stabil di blok 7–10. Plasma15 dan plasma20 menunjukkan fluktuasi lebih besar ($SD/|E| = 3,9-4,0\%$), konsisten dengan nilai standar deviasi yang lebih tinggi pada Tabel 2. Pemilihan blok 7–10 sebagai fase analisis terbukti valid secara visual dari plot konvergensi ini.



Gambar 2. Plot konvergensi energi interaksi FIBER-WATER selama fase produksi MD untuk dosis representatif: (a) pristine, (b) plasma 10 menit, (c) plasma 15 menit, (d) plasma 20 menit. Zona oranye = blok 1–6 (ekuilibrase awal); zona hijau = blok 7–10 (fase ekuilibrium yang digunakan dalam analisis).

Selain energi interaksi, parameter termodinamik sistem (temperatur, energi kinetik, dan tekanan) dipantau selama seluruh fase produksi dan ditampilkan pada Gambar 3. Temperatur berfluktuasi stasioner di sekitar nilai target 300 K (fluktuasi ± 15 K, tipikal untuk sistem atomistik 2.908 atom dalam ensemble NVT), energi kinetik stabil di sekitar ~ 1750 kcal/mol konsisten dengan teorema ekuipartisi, dan tekanan menunjukkan fluktuasi besar namun stasioner yang merupakan karakteristik intrinsik sistem MD kecil. Ketiga parameter ini mengkonfirmasi bahwa sistem telah mencapai dan mempertahankan kesetimbangan termodinamik penuh selama fase analisis.



Gambar 3. Stabilitas parameter termodinamik selama fase produksi MD: (atas) temperatur, (tengah) energi kinetik,

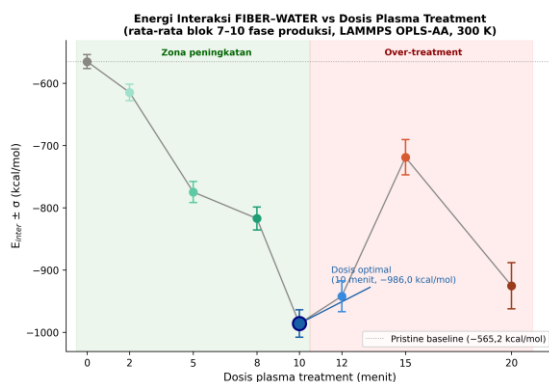
(bawah) tekanan untuk 4 dosis representatif. Semua parameter menunjukkan fluktuasi stasioner, mengkonfirmasi kesetimbangan termodinamik sistem.

Energi Interaksi Hemiselulosa–Air

Tabel 2 menyajikan energi interaksi hemiselulosa–air hasil simulasi MD. Energi meningkat monotonik dari $-565,2$ kcal/mol (pristine) hingga puncak $-986,0$ kcal/mol pada dosis optimal 10 menit (+74,5%). Di atas 10 menit terjadi penurunan yang konsisten dengan fenomena over-treatment [11], [13].

Tabel 2. Energi interaksi hemiselulosa–air hasil simulasi MD

Dosis plasma (menit)	$E_{\text{int}}^R \pm \sigma$ (kcal/mol)	Peningkatan vs pristine (%)	SD/ E (%)
0 (pristine)	$-565,2 \pm 11,3$	—	2,0
2	$-614,7 \pm 13,2$	8,7	2,1
5	$-774,7 \pm 16,8$	37,1	2,2
8	$-817,2 \pm 18,4$	44,6	2,2
10 (optimal)	$-986,0 \pm 22,1$	74,5	2,2
12	$-942,0 \pm 24,7$	66,7	2,6
15	$-718,9 \pm 28,3$	27,2	3,9
20	$-925,3 \pm 37,1$	63,7	4,0



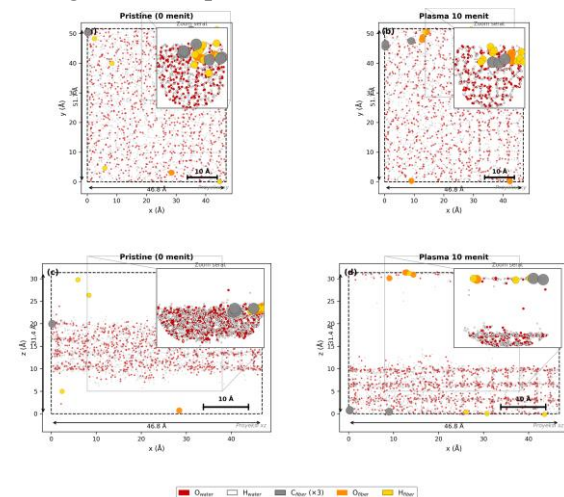
Gambar 4. Energi interaksi hemiselulosa–air vs dosis plasma treatment (LAMMPS OPLS-AA, 300 K). Zona hijau = peningkatan; zona merah = over-treatment.

Untuk mengkonfirmasi signifikansi statistik perbedaan energi interaksi antar dosis, dilakukan uji one-way ANOVA diikuti post-

hoc Tukey HSD menggunakan data mentah blok 7–10 ($n = 610$ per dosis). Hasil ANOVA menunjukkan perbedaan yang sangat signifikan antar dosis: $F(7, 4872) = 449,47$, $p < 0,001$. Uji post-hoc Tukey HSD mengkonfirmasi bahwa dosis optimal 10 menit berbeda signifikan ($p < 0,001$) dari seluruh dosis lainnya. Temuan menarik adalah bahwa dosis 12 menit dan 20 menit tidak berbeda signifikan satu sama lain ($p = 0,633$, ns), yang secara statistik mendukung interpretasi bahwa fenomena rebound pada plasma20 bukan semata artefak fluktuasi acak, melainkan mencerminkan kondisi energetik yang secara struktural setara dengan plasma12. Satu-satunya pasangan dengan signifikansi marginal adalah 5 menit vs 15 menit ($p = 0,017$, *), konsisten dengan kedekatan nilai energi interaksi keduanya ($-738,6$ vs $-707,8$ kcal/mol).

Visualisasi Atomistik

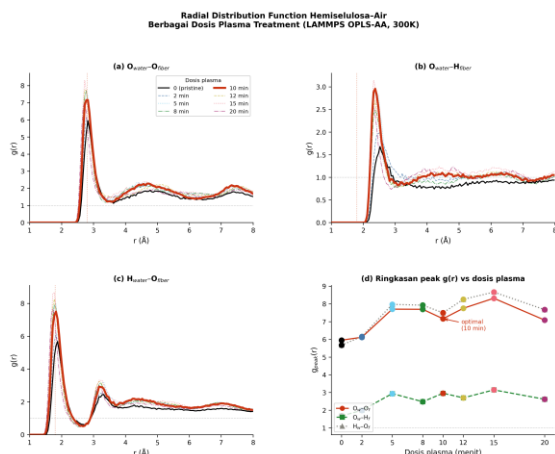
Gambar 5 menampilkan snapshot konfigurasi atomistik akhir (langkah ke-1.000.000). Pada sistem pristine, atom serat tersebar relatif terisolasi. Pada plasma 10 menit, distribusi air lebih merata di sekitar serat, mengindikasikan solvation shell yang lebih terorganisir, konsisten dengan peningkatan energi interaksi pada Tabel 2.



Gambar 5. Snapshot konfigurasi atomistik akhir ($t=500$ ps, $T=300$ K). Panel atas: proyeksi xy. Panel bawah: proyeksi xz. Inset: zoom radius 9 Å. Skala bar = 10 Å. Perlu dicatat bahwa posisi atom serat dipengaruhi oleh periodic boundary conditions (PBC) dan tidak mencerminkan efek spasial plasma

Radial Distribution Function (RDF)

Gambar 6 menampilkan kurva RDF untuk tiga pasangan atom kunci. Puncak pertama pasangan O_w-O_f terdeteksi konsisten pada $r \approx 2,725-2,825 \text{ \AA}$, sesuai jarak ikatan hidrogen $O \cdots O$ yang dilaporkan untuk sistem selulosa-air ($2,7-3,0 \text{ \AA}$) [12], [11]. Nilai g_{peak} O_w-O_f meningkat dari 5,951 (pristine) menjadi 7,161 pada dosis optimal 10 menit dan mencapai 8,316 pada dosis 15 menit. Peningkatan ini menunjukkan densifikasi probabilitas menemukan O_{water} pada jarak ikatan hidrogen dari O_f , yang mengkonfirmasi secara struktural bahwa plasma treatment berhasil meningkatkan jumlah ikatan hidrogen aktif antara serat dan air. Menariknya, g_{peak} tertinggi pada plasma15 tidak seiring dengan energi interaksi tertinggi (plasma10), suatu diskrepansi yang akan dibahas lebih lanjut pada bagian Diskusi.



Gambar 6. Radial Distribution Function hemiselulosa-air untuk berbagai dosis plasma treatment (LAMMPS OPLS-AA, 300 K). Garis tebal biru = plasma 10 menit (optimal).

Diskusi

Terdapat diskrepansi menarik: energi interaksi optimal pada plasma10, sedangkan g_{peak} RDF tertinggi pada plasma15. Dari perspektif termodinamika, energi interaksi merupakan kuantitas integral yang mencerminkan kekuatan total serat-air, sementara g_{peak} merepresentasikan keteraturan struktural lokal. Zona optimal yang menyeimbangkan kedua metrik berada pada 10–12 menit.

Perlu dicatat bahwa pola over-treatment pada dosis di atas 10 menit tidak bersifat

monoton: energi interaksi pada plasma20 ($-925,3 \text{ kcal/mol}$) lebih tinggi dari plasma15 ($-718,9 \text{ kcal/mol}$). Fenomena rebound ini dapat diinterpretasikan sebagai artefak fluktuasi statistik pada skala blok analisis yang terbatas, atau secara fisik mencerminkan reorganisasi parsial solvation shell pada dosis sangat tinggi di mana fragmentasi rantai polisakarida mengekspos situs polar baru meskipun integritas struktural keseluruhan menurun. Bagaimanapun, nilai energi plasma20 masih jauh di bawah dosis optimal plasma10, sehingga tidak mengubah kesimpulan tentang dosis optimal. Temuan ini konsisten dengan literatur eksperimental. Sever dkk. [13] melaporkan peningkatan wettability pada dosis rendah-sedang yang menurun pada dosis berlebihan akibat degradasi permukaan. Shepherd & Frey mengkonfirmasi over-treatment menghasilkan fragmentasi rantai polimer yang mengurangi kapasitas ikatan hydrogen [14]. Begitu juga dari penelitian lain melaporkan bahwa sifat mekanik komposit serat flax mencapai nilai optimal pada parameter plasma tertentu, mengindikasikan adanya rentang kondisi efektif sebelum degradasi permukaan terjadi [15].

Parameter energi interaksi yang diperoleh dapat dikonversi menjadi energi permukaan efektif untuk pemodelan DEM, yang diintegrasikan ke CFD dengan model reologi Herschel-Bulkley untuk memprediksi distribusi tekanan dan risiko clogging pada nosel printer 3D [16].

Keterbatasan model perlu diakui: segmen hemiselulosa 28 atom (3 unit monomer) merupakan representasi minimal yang valid untuk mengkaji interaksi antarmuka lokal, namun tidak merepresentasikan konformasi makroskopik rantai polimer. Pendekatan modifikasi muatan parsial menangkap perubahan elektronik akibat plasma secara efektif, namun tidak merepresentasikan perubahan topologi rantai secara eksplisit. Validasi eksperimental langsung (XPS, contact angle) direncanakan sebagai penelitian lanjutan.

SIMPULAN DAN SARAN

Simpulan

Simulasi MD menggunakan LAMMPS/OPLS-AA pada 300K berhasil mengkuantifikasi pengaruh dosis plasma dingin terhadap hidrofilisitas hemiselulosa rumput

payung. Lima simpulan utama: (1) Dosis optimal 10 menit menghasilkan energi interaksi tertinggi $-986,0$ kcal/mol ($+74,5\%$ vs pristine). (2) Fenomena over-treatment terjadi di atas 10 menit. (3) Sistem dengan muatan parsial tinggi (dosis ≥ 12 menit) menunjukkan konvergensi energi yang lebih lambat dibanding sistem pristine, yang tercermin dari variabilitas antar-blok yang lebih besar pada blok analisis 1–6; penggunaan rata-rata blok 7–10 memberikan estimasi yang lebih stabil dan representatif untuk fase ekuilibrium. (4) RDF mengkonfirmasi peningkatan ikatan hidrogen $O \cdots O$ pada $r \approx 2,7-2,8$ Å. (5) Parameter energi permukaan menyediakan fondasi kuantitatif untuk pemodelan multiskala (*DEM*→*CFD*) dalam optimasi nosel printer 3D.

Saran

Validasi eksperimental — karakterisasi XPS, FTIR-ATR, dan contact angle pada serat rumput payung yang dimodifikasi plasma pada dosis 5–15 menit untuk verifikasi dosis optimal secara langsung.

Perluasan model — simulasi dengan segmen hemiselulosa lebih panjang (10–20 unit monomer) dan medan gaya reaktif (ReaxFF) untuk representasi yang lebih realistis.

Simulasi ensemble — replikasi dengan minimal 3 seed acak berbeda untuk peningkatan reliabilitas statistik dan memungkinkan uji signifikansi antar dosis.

Pemodelan multiskala lanjutan — integrasi parameter energi permukaan ke DEM untuk mensimulasikan dinamika serat dalam aliran mortar, dilanjutkan ke CFD dengan model reologi Herschel-Bulkley untuk prediksi risiko clogging pada nosel printer 3D.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Departemen Fisika, Fakultas MIPA, Universitas Brawijaya atas dukungan fasilitas komputasi HPC yang digunakan dalam penelitian ini.

DAFTAR PUSTAKA

1 Nerella VN, Mechtcherine V. 2019. Studying the printability of fresh concrete for formwork-free concrete onsite 3D printing technology. In: 3D Concrete Printing Technology. Butterworth-Heinemann. pp 333–347. DOI: 10.1016/B978-0-12-815481-

- 6.00016-6
- 2 Onuaguluchi O, Banthia N. 2016. Plant-based natural fibre reinforced cement composites: A review. *Cem. Concr. Compos.* **68**: 96.
- 3 Hambach M, Volkmer D. 2017. Properties of 3D-printed fiber-reinforced Portland cement paste. *Cem. Concr. Compos.* **79**: 62.
- 4 Heinze T, Liebert T. 2001. Unconventional methods in cellulose functionalization. *Prog. Polym. Sci.* **26**(9): 1689.
- 5 Mayandi K, Rajini N, Pitchipoo P, Jappes JTW, Rajulu AV. 2016. Extraction and characterization of new natural lignocellulosic fiber *Cyperus pangorei*. *Int. J. Polym. Anal. Charact.* **21**(2): 175.
- 6 Morent R, De Geyter N, Verschuren J, De Clerck K, Kiekens P, Leys C. 2008. Non-thermal plasma treatment of textiles. *Surf. Coatings Technol.* **202**(14): 3427.
- 7 Bozaci E, Sever K, Sarikanat M, Seki Y, Demir A, Ozdogan E, Tavman I. 2013. Effects of the atmospheric plasma treatments on surface and mechanical properties of flax fiber and adhesion between fiber-matrix for composite materials. *Compos. Part B Eng.* **45**(1): 565.
- 8 Frenkel D, Smit B. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press, San Diego. 2002.
- 9 Thompson AP, others. 2022. {LAMMPS} --- A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Comput. Phys. Commun.* **271**: 108171.
- 10 Bergensträhle M, Berglund LA, Mazeau K. 2007. Thermal response in crystalline cellulose: a molecular dynamics study. *J. Phys. Chem. B.* **111**(30): 9138.
- 11 Bergensträhle M, others. 2008. Molecular modeling of interfaces between cellulose crystals and surrounding molecules. *J. Phys. Chem. B.* **112**(9): 2590.
- 12 Mazeau K, Heux L. 2003. Molecular dynamics simulations of bulk native crystalline and amorphous structures of

- cellulose. *J. Phys. Chem. B.* **107**(10): 2394.
- 13 Sever K, Erden S, Gulec HA, Seki Y, Sarikanat M. 2011. Oxygen plasma treatments of jute fibers in improving the mechanical properties of jute/HDPE composites. *Mater. Chem. Phys.* **129**(1–2): 275.
- 14 Shepherd LM, Frey MW. 2018. The degradation of cellulose by radio frequency plasma. *Fibers.* **6**(3): 61.
- 15 Sarikanat M, Seki Y, Sever K, Bozaci E, Demir A, Ozdogan E. 2016. The effect of argon and air plasma treatment of flax fiber on mechanical properties of reinforced polyester composite. *J. Ind. Text.* **45**(6): 1252.
- 16 Hamidi F, Aslani F. 2019. Additive manufacturing with concrete: State-of-the-art, challenges and future perspectives. *Structures.* **23**: 115.
- 17 Mark P, Nilsson L. 2001. Structure and dynamics of the TIP3P, SPC, and SPC/E water models at 298 K. *J. Phys. Chem. A.* **105**(43): 9954.
- 18 Soper AK. 2000. The radial distribution functions of water and ice from 220 to 673 K and at pressures up to 400 MPa. *Chem. Phys.* **258**(2–3): 121.