

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION TO INVESTIGATE SURFACE PROPERTIES OF ZIRCONIA, YTTRIA, AND YTTRIA-STABILIZED ZIRCONIA USING EFFECTIVE PARTIAL CHARGE MODEL

Bagas Akbar Tanjung
15/386880/PA/17057

ABSTRACT

In this work, a newly parameterized Coulomb plus Buckingham potential formulation for Zirconia (ZrO_2), Yttria (Y_2O_3), and yttria-stabilized zirconia (YSZ) is presented. It is shown that the density and pair distribution acquired for ZrO_2 and Y_2O_3 at room temperature are in excellent agreement with the experimental data from past researches, and the vibrational power spectra obtained are highly similar when compared to those obtained via *ab-initio* molecular dynamics simulation at PBEsol level. In addition to that, it is shown that the use of effective partial charge has several advantages when compared to interaction potentials which employ the oxidation states in the evaluation of the Coulombic interaction: (i) the diffusion coefficient and the associated energy of activation of oxygen ions evaluated for YSZn (n=4 to 12) displays the best agreement with the experimental data; (ii) no non-physical reorganization of the interface, and the bulk are observed in simulations of the (110) and (111) surfaces of ZrO_2 and Y_2O_3 , while the coulombic contributions in full-charge models caused a change in the structure in the case of ZrO_2 , and (iii) the use of effective partial charges establish compatibility with existed solvent models and force-fields for molecular compound treatment.

Keywords: Buckingham, Coulomb, Partial charge, Yttria-stabilized zirconia, Yttria, Zirconia

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER UNTUK MENGINVESTIGASI
SIFAT PERMUKAAN ZIRKONIA, YTTRIA, DAN ZIRKONIA
TERSTABILISASI YTTRIA MENGGUNAKAN MUATAN PARSIAL
EFEKTIF**

Bagas Akbar Tanjung
15/386880/PA/17057

INTISARI

Dalam percobaan ini, potensial Coulomb-Buckingham untuk Zirkonia(ZrO_2), Yttria(Y_2O_3), dan Yttria-stabilized Zirkonia(YSZ) telah dirumuskan. Dapat dilihat bahwa densitas dan distribusi pasangan yang diperoleh untuk ZrO_2 dan Y_2O_3 pada suhu ruangan menunjukkan kecocokan yang sangat baik dengan data eksperimen dari penelitian-penelitian sebelumnya, dan spektra vibrasi yang diperoleh menunjukkan kemiripan yang sangat tinggi jika dibandingkan dengan yang diperoleh dari dinamika molekuler *ab-initio* pada tingkat PBEsol. Selain itu, juga dapat dilihat bahwa penggunaan muatan parsial efektif memiliki beberapa keunggulan jika dibandingkan dengan interaksi potensial yang menggunakan muatan oksidasi penuh saat interaksi Coulomb; (i) koefisien difusi dan energi yang terkait dari aktivasi ion oksigen yang dievaluasi dari YSZn ($n=4$ sampai 12) menunjukkan kecocokkan terbaik dengan data hasil eksperimen; (ii) tidak ada reorganisasi non-fisik yang diamati di simulasi pada permukaan (110) dan (111) dari ZrO_2 dan Y_2O_3 , sementara kontribusi coulomb dengan muatan penuh menimbulkan perubahan di struktur ZrO_2 dan Y_2O_3 , dan (iii) penggunaan muatan parsial menunjukkan kesesuaian dengan model solven dan *force-fields* untuk perlakuan senyama molekuler.

Kata Kunci: Buckingham, Coulomb, Muatan parsial, Yttria-stabilized zirconia,
Yttria, Zirkonia