الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي





Université Ferhat Abbas Sétif 1
Faculté des Sciences
Département de Physique

جامعـــة سطيف 1 فرحـــــات عباس
كليـــة العلـــــــوم
قســـــم الفيزياء

Mémoire de Master

Domaine : Sciences de la Matière

Filière : Physique

Spécialité : Physique des Matériaux

Titre

Étude ab_initio des propriétés structurales, élastiques et électroniques de l'oxyde de magnésium MgO

Présenté par
BEN AZOUZ Amina

Encadré par
M. ZERROUG Samir

Jury d'examen :

Président	**M. LADJADJ Youcef (MCB)**	**Université Ferhat Abbas Sétif 1**
Encadreur	**M. ZERROUG Samir (MCA)**	**Université Ferhat Abbas Sétif 1**
Examinateur	**M. HAMZA Djamel Eddine (MCA)**	**Université Ferhat Abbas Sétif 1**

2025 / 2026

Table des matiéres

Listes des figures ……... 1

Liste des tableaux …….. 2

Liste des abréviations …… 3

Introduction Générale ……... 5

Références bibliographiques …… 7

Chapitre 1 : …… 9

1. L'oxyde de magnésium MgO ……... 9
1.1 Généralités……9
1.2 Propriétés de l'oxyde de magnésium …..…… 9
1.3 Structure cristalline du MgO …… 10
1.4 Production et applications ……...11
1.4.1 Modes de production …… 11
1.4.2 Applications …….. 12
1.4.2.1 Réfractaires et industrie …….. 12
1.4.2.2 Construction …… 12
1.4.2.3 Médical et pharmacetique ……... 12
1.4.2.4 Environnement …… 13
1.4.2.5 Applications émergentes …… 13
1.5 Références bibliographiques …….. 13

Chapitre 2: …… 16

2. Méthode de calcul la Théorie de la fonctionnelle de la Densité (DFT) et le code WIEN2k ……..16
2.1 Introduction …… 16
2.2 Bases théoriques …… 16

2.2.1 Approximation de Born-Oppenheimer …… 17

2.2.2 Approximation de Hartree ……... 17

2.2.3 Approximation de Hartree-Fock …….. 18

2.3.1 Théorèmes de Hohenberg et Kohn ……... 19

2.3.2 Les équations de Kohn et Sham ……... 20

2.3.3 Approximation de l'énergie d'échange-corrélation : LDA et GGA ……22

a- l'approximation de la densité locale (LDA) …… 22

Caractéristiques pratiques de la LDA : ……. ……... 22

b- L'approximation du gradient généralisé (GGA) ……... 22

2.3.4 La méthode FP-LAPW ……... 23

a- Méthode APW (Slater, 1937) …… 24

b- Méthode LAPW (Andersen, 1975)[9]…… 25

Avantages de la LAPW par rapport à l'APW ……... 25

c- Orbitales locales : LAPW+lo et APW+lo ……..... 25

2.4 Le code de simulation WIEN2k …… 25

2.4.1 Présentation du code WIEN2k ……. 25

2.4.2 Organisation des fichiers et déroulement d'un calcul WIEN2k ……26

a- Préparation du fichier de structure …… 26

b- Initialisation (init - lapw)……. 26

c- Cycle auto-cohérent (run - lapw) …….. 26

d- Calcul des propriétés ……. 29

2.5 Conclusion …….. 29

2.6 Références bibliographiques …….. 30

Chapitre 3: …… ……... 32

3. Résultats et discussions Propriétés structurales, élastiques et électroniques du MgO (phase B1)…… 32

3.1 Introduction …… 32

3.2 Méthode de calcul …….. 33

3.3 Propriétés structurales …… 33

3.3.1 Optimisation structurale et comparaison des phases ……. 33

3.3.2 Comparaison avec la littérature- phase B1 …… 35

3.3.3 Transition de phase B1→ B2 sous pression …….. 36

3.4 Propriétés élastiques …… 38

3.4.1 Formalisme et définitions ……. 38

3.4.2 Résultats à pression nulle – comparaison avec la littérature ……38

3.4.3 Évolution des propriétés élastiques sous pression ……... 39

a- Durcissement axial (C_{11}) …….. 41

b- Vérification des critères de stabilité mécanique de Born ……. 41

3.4.4 Anisotropie, ductilité et condition de Cauchy sous pression ……... 41

3.5 Propriétés électroniques du MgO (phase B1) sous pression ……... 42

3.5.1 Cadre théorique ……..... 42

3.5.2 Structure de bandes a pression nulle …… 43

a- Nature et position du gap …….. 44

b- Caractère orbital des bandes ……. 44

c- Comparaison GGA / mBJ ……. 45
3.5.3 Comparaison du gap à 0 GPa avec la littérature …….. 45
3.5.4 Évolution du gap d'énergie sous pression …… 46
a- Augmentation du gap direct Γ–Γ sous pression …… 49
b- Quasi-invariance du gap indirect Γ–X …….. 50
c- Transition gap direct → indirect : résultat original …… 50
3.5.5 Stabilité électroniques sous pression …… 50
3.5.6 Synthèse des résultats électroniques …… 51
3.6 Conclusion …….. 51
3.7 Références bibliographiques ……... 53
Conclusion Générale ……..…….55
Résumé ……. 56

Résumé

Ce mémoire est consacré à l'étude systématique des propriétés structurales, élastiques et électroniques de l'oxyde de magnésium (MgO) sous pression hydrostatique. Les calculs ab initio ont été effectués par la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel intégral (FP-LAPW) implémentée dans le code WIEN2k, basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les approximations GGA-PBE et le potentiel mBJ ont été exploités pour l'échange et la corrélation. Le premier chapitre introduit les généralités, la structure cristalline et les applications du MgO. Le deuxième chapitre détaille les fondements théoriques de la DFT ainsi que le formalisme de la méthode FP-LAPW. Le troisième chapitre expose et discute les résultats numériques obtenus. L'analyse structurale confirme que la phase B1 (NaCl) est la plus stable à pression ambiante a_0 = 4,258 Å, B_0 = 148,3 GPa, en excellent accord avec l'expérience, tandis que la transition de phase de structure B1 vers B2 (CsCl) est prédite à environ 511 GPa. Sur le plan mécanique, les constantes élastiques C_{11}, C_{12}, C_{44} augmentent sous contrainte, confirmant la rigidification du matériau, et mettent en évidence un changement d'anisotropie à 20 GPa. Sur le plan électronique, le MgO présente un gap d'énergie direct à 0 GPa. La fonctionnelle GGA sous-estime ce gap (4,47 eV), alors que la correction mBJ l'améliore significativement (6,56 eV). Sous pression, ce gap s'élargit et une transition vers un gap indirect est prédite vers ~195 GPa.

Mots-clés : MgO, DFT, FP-LAPW, WIEN2k, Élastique, Gap d'énergie, Pression, Transition de phase.

Abstract

This thesis is devoted to the systematic study of the structural, elastic, and electronic properties of magnesium oxide (MgO) under hydrostatic pressure. Ab initio calculations were performed using the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method implemented in the WIEN2k code, based on density functional theory (DFT). The GGA-PBE approximations and the mBJ potential were used for exchange and correlation. The first chapter introduces general principles, the crystal structure, and applications of MgO. The second chapter details the theoretical foundations of DFT and the formalism of the FP-LAPW method. The third chapter presents and discusses the numerical results obtained. Structural analysis confirms that phase B1 (NaCl) is the most stable at ambient pressure (a_0 = 4.258 Å, B_0 = 148.3 GPa), in excellent agreement with experimental results, while the phase transition from structure B1 to

B2 (CsCl) is predicted at approximately 511 GPa. Mechanically, the elastic constants C_{11}, C_{12}, and C_{44} increase under stress, confirming the stiffening of the material, and highlight a change in anisotropy at 20 GPa. Electronically, MgO exhibits a direct energy gap at 0 GPa. The GGA functional underestimates this gap (4.47 eV), while the mBJ correction significantly improves it (6.56 eV). Under pressure, this gap widens, and a transition to an indirect gap is predicted at approximately 195 GPa.
Keywords: MgO, DFT, FP-LAPW, WIEN2k, Elastic, Energy gap, Pressure, Phase transition.

ملخص

تُكرَّس هذه الأطروحة للدراسة المنهجية للخواص البنيوية والمرنة والإلكترونية لأكسيد المغنيسيوم (MgO) تحت ضغط هيدروستاتيكي. أُجريت حسابات مبدئية باستخدام طريقة الموجة المستوية المعززة الخطية ذات الجهد الكامل (FP-LAPW) لمُطبَّقة في برنامج WIEN2k ، والمستندة إلى نظرية الكثافة الوظيفية (DFT). استُخدمت تقريبات GGA-PBE وجهد mBJ للتبادل والترابط. يُقدِّم الفصل الأول المبادئ العامة، والبنية البلورية، وتطبيقات أكسيد المغنيسيوم. يُفصِّل الفصل الثاني الأسس النظرية لنظرية الكثافة الوظيفية (DFT) وصيغة طريقة الموجة المستوية المعززة الخطية ذات الجهد الكامل (FP-LAPW). يعرض الفصل الثالث النتائج العددية المُتحصَّل عليها ويناقشها. يؤكد التحليل البنيوي أن الطور B1 (كلوريد الصوديوم) هو الأكثر استقرارًا عند الضغط الجوي (a_0 = 4.258 Å، B_0 = 148.3 جيجا باسكال)، وهو ما يتوافق تمامًا مع النتائج التجريبية، بينما يُتوقع حدوث تحول طوري من البنية B1 إلى B2 (كلوريد السيزيوم) عند حوالي 511 جيجا باسكال. ميكانيكيًا، تزداد ثوابت المرونة C_{11} و C_{12} و C_{44} تحت تأثير الإجهاد، مما يؤكد تصلب المادة، ويُبرز تغيرًا في الخواص المتباينة عند 20 جيجا باسكال. إلكترونيًا، يُظهر أكسيد المغنيسيوم فجوة طاقة مباشرة عند 0 جيجا باسكال. يُقلل دالة GGA من قيمة هذه الفجوة (4.47 إلكترون فولت)، بينما يُحسّنها تصحيح mBJ بشكل ملحوظ (6.56 إلكترون فولت). تحت الضغط، تتسع هذه الفجوة، ويُتوقع حدوث تحول إلى فجوة طاقة غير مباشرة عند حوالي 195 جيجا باسكال.

الكلمات المفتاحية : MgO ، DFT، FP-LAPW، WIEN2k، مرن، فجوة الطاقة، الضغط، الانتقال الطوري.