

Ab Initio Study of Electronic and optical properties of cesium Chloride

Maqboulah Abdulqadir Mohmmmed Bousayf*

Department of Physics, Faculty of Science, Ajdabiya University, Ajdabiya, Libya

دراسة من المبادئ الأولية للخصائص الإلكترونية والبصرية لمركب كلوريد السيزيوم

مقبولة عبد القادر محمد بوسيف*

قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة اجدابيا، اجدابيا، ليبيا

*Corresponding author: mboseaf@uoa.edu.ly

Received: July 16, 2026

Accepted: September 26, 2026

Published: October 12, 2026

Copyright: © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abstract:

In this research, we conducted a theoretical study of CsCl using first-principles calculations based on density functional theory (DFT) within the local density approximation (LDA) implemented via siesta software package. calculations included electronic and optical properties of this compound and compare the outcomes with prior literature. The numerical outcomes demonstrate a wide band gap of 5.0357eV, with the valence band maximum (VBM) and conduction band minimum (CBM) pinned at -3.0408eV and 1.9946eV. Regarding the evaluation of the optical properties derived from the dielectric function, it shows that the absorption coefficient remains negligible below the gap before surging sharply in the ultraviolet (UV) domain, reaching peak value of nearly $2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$. This surge aligns with maximum reflectivity of approximately 0.7 at a plasmon resonance energy of around 16.5eV. These insights confirm that CsCl combines excellent visible-to-infrared transparency with a robust UV photonic responsiveness, establishing suitability for advanced optical windows and spectral filter applications.

Keywords: Cesium chloride, Density functional theory, electronic properties, optical properties, siesta software.

المخلص:

في هذا البحث قمنا بدراسة نظرية لمركب كلوريد السيزيوم اعتمادا على حسابات المبادئ الأولية المبينة على نظرية دالة الكثافة الوظيفية ضمن تقريب الكثافة المحلية (LDA) باستخدام برنامج siesta. وقد تضمنت الحسابات الخصائص الإلكترونية والبصرية لهذا المركب مع مقارنتها بالدراسات السابقة. وقد أظهرت المخرجات الحسابية أن المركب يمتلك فجوة طاقة واسعة تبلغ 5.0357eV، حيث تتموضع حزمة التكافؤ عند -3.0408eV، بينما يقع قاع حزمة التوصيل عند 1.9949eV، وفيما يتعلق الخصائص البصرية المستخلصة من دالة العزل ومعاملات التفاعل، فقد تبين أن معامل الامتصاص يضمحل تماما دون عتبة فجوة الطاقة ثم يرتفع بشكل حاد ضمن نطاق الأشعة فوق بنفسجية ليسجل قيمة عظمى تقترب من $2 \times 10^6 \text{cm}^{-1}$ مترافقا مع بلوغ الانعكاسية ذروتها العظمى عند قيمة تعادل 0.7 عند طاقة رنين البلازما البالغة حوالي 16.5eV. وتؤكد دالة فقد الطاقة وجود قمة بلازما حجمية واضحة عند النطاق ذاته. وتبرهن هذه النتائج بوضوح أن مركب كلوريد السيزيوم يتمتع بشفافية عالية في المجالين المرئي والأحمر، مع استجابة فونونية في طيف الأشعة فوق بنفسجية (UV)، مما يجعله خيارا مناسباً ووعدا لتطبيقات النواظف الضوئية والمرشحات الطيفية المتطورة.

الكلمات المفتاحية: كلوريد السيزيوم، نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)، الخصائص الإلكترونية، الخصائص البصرية، جزمة برمجيات. siesta.

المقدمة:

تعد هاليدات الفلزات القلوية من المواد المهمة في التطبيقات البصرية والإلكترونية، وذلك لما تتمتع به من خصائص بنبوية والكترونية مميزة. ومن بين هذه المواد حظت هاليدات السيزيوم باهتمام خاص، وذلك لما تتمتع به من خصائص فيزيائية متنوعة. ففي درجات الحرارة المنخفضة، تمتاز هذه المواد بسعة حرارية عالية، وطبيعة غير مغناطيسية، وتوصيلية حرارية مرتفعة، بالإضافة لكونها مواد عازلة كهربائياً. وقد استخدمت هذه المواد في تصنيع الكاثودات الضوئية لقدرتها العالية على إطلاق الكترونات عند امتصاص الفوتونات في نطاق الأشعة فوق بنفسجية، خصوصاً عند الأطوال الموجية القصيرة مثل EUV وFUV، لذلك تعد هذه المواد خيار جيد للاستخدام في كواشف الفوتونات وأجهزة القياس الطيفي عالية الحساسية (Group, 2006)، كما تم استخدام هذه المركبات على نطاق واسع في الدراسات النظرية والتجريبية لفهم تفاعل الإشعاع الكهرومغناطيسي مع الشبكات البلورية الأيونية خصوصاً في مجال الأشعة تحت الحمراء، حيث يحدث امتصاص رنيني ناتج عن أنماط الاهتزازات الشبكية في البلورات (Rothwell, 1974) كما تم توصيف هذه المواد بفعالية في تقنيات الطب النووي وعلاجات الأورام السرطانية (States, 1981) وفي تشخيص احتشاء عضلة القلب. (Gleason et al., 1964) وبعد مركب كلوريد السيزيوم أحد أهم مركبات هذه العائلة، إذ يتميز ببنية بلورية مكعبة من نمط (B2)، ضمن مجموعة الفضاء الفراغي (pm-3m)، حيث تقع ذرة السيزيوم عند مركز الخلية البلورية بينما تقع ذرات الكلور عند زوايا المكعب، ومن منظور طاقي يصنف هذا المركب كمادة عازلة ذات فجوة طاقة واسعة تبلغ (8.35eV) في الظروف القياسية، مما يمنحه شفافية بصرية عالية عند نطاق فوق البنفسجي وصولاً إلى الأشعة تحت حمراء، مما يجعله مؤهلاً للاستخدام في صناعة النوافذ البصرية والمنشورات وأجهزة التحليل الطيفي الدقيقة (Naeemullah et al., 2014). وقد ساهم التطور الهائل في تقنيات المحاكاة الحاسوبية في دراسة هذا النوع من المواد بكفاءة عالية، خاصة باستخدام المبادئ الأولية المستندة على نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT). ويعتبر برنامج siesta أحد البرامج الفعالة في هذا المجال، حيث يعتمد على المدارات الذرية المحلية (Localized Atomic Orbitals)، مما يتيح دراسة الخصائص البنيوية، والإلكترونية، والميكانيكية بكفاءة حسابية جيدة، وخصوصاً في الأنظمة البلورية والمواد النانوية.

الدراسات السابقة:

وقد أهتم العديد من الباحثين بدراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية والبصرية لمركب كلوريد السيزيوم، وذلك لما يمتلكه هذا المركب من خصائص فيزيائية مهمة وتطبيقات علمية متعددة في مجال المواد البصرية والإلكترونية. وقد استخدمت نظرية دالة الكثافة الوظيفية (DFT) على نطاق واسع لدراسة هذه الخصائص، حيث تعد من أهم الطرق الحسابية في فيزياء الحالة الصلبة (Materials et al., 2013). حيث قام (Naeemullah et al., 2014) بدراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية والبصرية لمركب كلوريد السيزيوم باستخدام طريقة الموجات المستوية المتزايدة خطياً (FP-LAPW) ضمن إطار نظرية دالة الكثافة الوظيفية (DFT). وقد أظهرت نتائج الدراسة أن المركب يمتلك فجوة طاقة واسعة في الظروف الطبيعية تقدر بحوالي (6.95eV)، مما يشير إلى طبيعته العازلة كهربياً. كما بينت الدراسة أن فجوة الطاقة تتناقص مع زيادة الضغط حيث يحدث تداخل بين حزم التكافؤ وحزم التوصيل، مما يؤدي إلى تحول المركب من عازل إلى فلز عند الضغوط العالية. كما تمت دراسة العديد من الخصائص البصرية مثل الدالة العازلة والانعكاسية والتوصيلية البصرية. وفي دراسة أخرى قام (Bingol et al., 2015a) بإجراء دراسة نظرية شاملة للخصائص البنيوية والإلكترونية والبصرية والديناميكية والحرارية لمركب كلوريد باستخدام حسابات (DFT) ضمن تقريب (GGA) وأشار النتائج أن المركب يمتلك فجوة طاقة غير مباشرة واسعة تقدر بحوالي (5.46eV) كما أثبتت الدراسة، من خلال حسابات أطيف الفونونات الاستقرار الديناميكي للمركب في مختلف اتجاهات منطقة بريليون، مما يعزز الموثوقية في النماذج النظرية المستخدمة لمحاكاة هذا النوع من البلورات. كما تناولت دراسة أجراها (Li et al., 2024) باستخدام برنامج VASP القائم على أساس المبادئ الأولى ضمن تقريب (GGA-PBE)، تقييم الاستقرار الميكانيكي لمركبات هاليدات السيزيوم، حيث أوضحت النتائج الاستقرار الميكانيكي لمركب كلوريد السيزيوم لاستيفائه شروط بورن للاستقرار. كما أوضحت نسبة بوغ ($\frac{B}{G} = 1.728$) السلوك الهش للمركب، إلى جانب تحديد طاقة التراص (GSFE) وصعوبة الانزلاق في الاتجاه $< 100 >$.

من خلال الدراسات السابقة يتضح أن الأبحاث التي تناولت مركب كلوريد السيزيوم قد اعتمدت طرق حسابية مختلفة، مثل طريقة الموجات المستوية المتزايدة خطياً (FP-LAPW) باستخدام برنامج (WIEN2K)، وتقريبات طاقة التبادل والارتباط مثل تقريب التدرج المعمم (GGA) باستخدام برنامج (ABINIT)، كم تم استخدام جزمة برمجيات (VASP) مع اعتماد تقريب التدرج المعمم (GGA) والتي تعد من الطرق الدقيقة في حساب البنية الإلكترونية للمواد. إلا أن هذه الطرق تتطلب قدرة حسابية عالية وزمناً أطول لإجراء الحسابات. بالرغم من أن هذه الأبحاث تناولت الخصائص البنيوية والإلكترونية والديناميكية والبصرية والميكانيكية لمركب كلوريد السيزيوم مازالت هذه الخصائص تتطلب المزيد من الدراسة باستعمال برامج محاكاة مختلفة ومناهج حسابية متنوعة من أجل تقييم النتائج وتعزيز دقتها وتقييم تأثير التقريبات المستخدمة

في المحاكاة ، كما أن اختلاف النتائج لهذه الدراسات جاءت تبعا لنوع دوال التبادل والارتباط والمعاملات الحسابية المختلفة، مما يتطلب إجراء دراسة بنهج مختلف لتحقيق من مدي توافق النتائج مع القيم النظرية والتجريبية المنشورة، ومن هذا المنطلق تم استخدام برنامج *siesta* في هذه الدراسة والذي يعتمد على دوال أساسية موضعية لتوصيف الدالات الموجية، مع استخدام الجهود الزائفة لوصف تأثير الإلكترونات مع النوى، ويساهم هذا النهج في تقليل التكلفة الحسابية مع الحفاظ على دقة جيدة في النتائج، وتهدف هذه الدراسة الي تقييم مدى دقة تقريب التدرج المعمم (LDA) في التنبؤ بالخواص الإلكترونية والبصرية لمركب كلوريد السيزيوم ومقارنته مع الدراسات السابقة.

التفاصيل الحسابية:

في هذه الدراسة تمت محاكاة الإلكترونية، والبصرية لمركب كلوريد السيزيوم ضمن اطار نظرية دالة الكثافة الوظيفية (DFT) باستخدام برنامج (Siesta)، الذي يعتمد على تمثيل الدوال الموجية بواسطة مجموعات الأساس الموضعية من نوع (Numerical Atomic Orbital) (Ordejón et al., 1996). ولوصف تأثير التبادل والارتباط بين الإلكترونات استخدام تقريب الكثافة المحلية (LDA-CA) (Ceperley & Alder, 1980). كما تم استخدام الجهود الزائفة المحسنة من نوع ONCVSP لتتمثل تأثير أنوية الذرات مع الإلكترونات كما تم اجراء اختبارات التقارب لتحديد القيم المثلى لمعاملات الحساب. وقد أظهرت النتائج أن قيمة طاقة القطع المناسبة هي (200Ry)، بينما تم توليد نقاط الشبكة في الفضاء المتبادل باستخدام شبكة (K-points) من نوع (Monkhorst-pack) بأبعاد (8x8x8)، كما تم معيار تقارب للطاقة الكلية قيمته (1meV) لضمان دقة النتائج الحسابية. كما أجريت عملية الاسترخاء البنيوي حتى بلغت قوى هيلمان فاينمان المؤثرة علي ذرات أقل من $0.005\text{eV}/\text{\AA}$ ، لتسفر هذه العملية عن بنية بلورية محسنة وثابت شبكة محسن يقدر ب (4.012A⁰)، وهي قيمة متوافقة مع نتائج التجريبية، وقد استخدمت البنية المحسنة لحساب الخصائص الإلكترونية والبصرية مع اعتماد شبكة k-points بأبعاد 12x12x12 لحساب الخصائص البصرية.

النتائج والمناقشة:

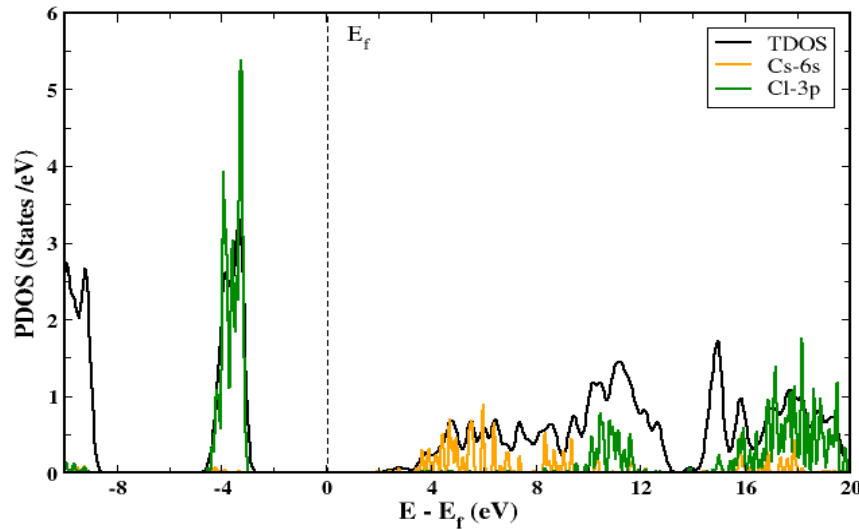
الخصائص الإلكترونية:

تمثل الخصائص الإلكترونية ركيزة اساسية في تحليل وتفسير طبيعة المادة سواء كانت عازلة، أو موصلة، أو شبه موصلة، فضلا عن دراسة الاواصر بين مكوناتها المختلفة، والعوامل المؤثرة على خصائصها الفيزيائية كنطاق الطاقة وكثافة الحالات الإلكترونية.

كثافة الحالات الإلكترونية:

تعتبر كثافة الحالات الإلكترونية (DOS)، إحدى الركيزات الجوهرية والمثيرة للاهتمام في فيزياء الحالة الصلبة، حيث تستخدم لتوصيف توزيع الكثافة وفقا لطاقة، وتحديد طبيعة الروابط المسؤولة عن التهجين الإلكتروني، مع تعيين السمات الطاقية لكل نطاق طاقي. كما تسمح هذه الكثافة بقياس عرض الفجوة الطاقية للمواد. ولغرض اجراء تحليل أكثر دقة لبنية النطاق، فقد تمت دراسة كثافة الحالات الإلكترونية. حيث يبين الشكل (2) كثافة الحالات الاجمالية (TDOS) والمقسطة (PDOS) لمركب كلوريد السيزيوم، حيث تمت اراحة مستوى طاقة فيرمي عند الصفر. ويعزي انعدام الحالات الإلكترونية عند مستوى فيرمي الي وجود فجوة طاقة واسعة نسبيا، تبلغ (5.0367eV) مما يؤكد الطبيعة العازلة للمركب ضمن هذا التقريب. ومن ناحية أخرى، يوجد فرق ملحوظ بين فجوة الطاقة التجريبية والتي تقدر بحوالي (8.35eV) والقيمة المحسوبة في هذه الدراسة، ويعزى هذا الاختلاف الي الحيد النظري المؤلف والمعروف في حسابات نظرية كثافة الدالة الوظيفية الناتجة عن التقريب المستخدم في معالجة الطاقة المتبادلة والترابطية، بينما تقترب من القيمة النظرية الناتجة من تقريب التدرج المعمم (GGA) البالغة 5.46eV (Bingol et al., 2015b).

كما نلاحظ أن حزمة التكافؤ الواقعة اسفل مستوى فيرمي تتكون بشكل أساسي من مدارات الكلور (Cl-3p) في النطاق الطاقي من 0eV الى -9eV، بينما تتشكل حزمة التوصيل فوق مستوى فيرمي من تداخل بين مدارات السيزيوم (Cs-6s) ومدارات الكلور (Cl-3p) عبر نطاق طاقي يمتد من 0eV الى 20eV، ويعد الفاصل الواضح بين الحالات الإلكترونية للمكونات الذرية دليلا واضحا على الترابط الأيوني القوي داخل مركب كلوريد السيزيوم.



شكل رقم (1): يوضح كثافة الحالات الإلكترونية لمركب كلوريد السيزيوم

الخصائص البصرية:

دالة العزل الكهربائي:

ترتكز طريقة حساب الخصائص البصرية على كثافة الحالات المشتركة المعدلة وفقاً لعناصر مصفوفة ثنائي القطب، إذ تنشأ الخصائص البصرية للمواد الصلبة عن استجابة نظام الإلكترونات لاضطراب الكهرومغناطيسي المعتمد على زمن والناتج عن الضوء الساقط. وترتبط دالة العزل الكهربائي المعتمدة على الزمن ارتباطاً وثيقاً ببنية حزم طاقة الإلكترونات في البلورات، وتعتبر هذه الدالة العنصر الأساسي لقياس الاستجابة البصرية للمواد تجاه التداخلات الكهرومغناطيسية، وتعرف بالعلاقة التالية:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) \quad (1)$$

الجزء الحقيقي لدالة العزل الكهربائي ويمثل انتشار الضوء داخل المادة. $\varepsilon_1(\omega)$ حيث:
- $\varepsilon_2(\omega)$: الجزء التخيلي لدالة العزل الكهربائي ويمثل امتصاص الضوء بواسطة المادة ويتم حسابه بواسطة العلاقة التالية : (Ambrosch - Draxl & Sofo, 2006)

$$\varepsilon_2(\omega) = \left(\frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2} \right) \sum_{i,j} \int < i | M | j >^2 f_i (1 - f_j) \delta(E_f - E_i - \omega) d^3 k \quad (2)$$

أما الجزء الحقيقي فيتم حسابه من الجزء التخيلي باستخدام علاقة كرامر - كروينغ (Szabo et al., 2010)

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2 \omega'}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (3)$$

هي القيمة الأساسية لتكامل الكوشي P حيث:

ويشكل الجزء الحقيقي والجزء التخيلي الأساس لمعامل الانكسار المركب ويعرف بالعلاقة التالية:

$$N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (4)$$

يمثل الجزء الحقيقي لمعامل الانكسار $n(\omega)$ والذي يعكس مدى امتصاص المادة) معامل الامتصاص (يمثل الجزء التخيلي لمعامل الانكسار: $k(\omega)$ لطاقة الموجة الساقطة وبناءً على ذلك يتم تحديد العوامل البصرية للمواد الصلبة المتبلورة، مثل معامل الانكسار، ومعامل الخمود، والانعكاسية، معامل الامتصاص، ودالة فقد الطاقة بالاعتماد على هاتين الدالتين:

$$\varepsilon_1(\omega) \text{ و } \varepsilon_2(\omega)$$

وبمعرفة الدالتين يمكن حساب معامل الانكسار باستخدام العلاقة الآتية:

$$n(\omega) = \left[\frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} + \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}}{2} \right]^{1/2} \quad (5)$$

ومعامل الخمود:

$$k(\omega) = - \left[\frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} + \frac{\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}}{2} \right]^{1/2} \quad (6)$$

ويحسب معامل الامتصاصية من العلاقة:

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2}\omega \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (7)$$

والانعكاسية:

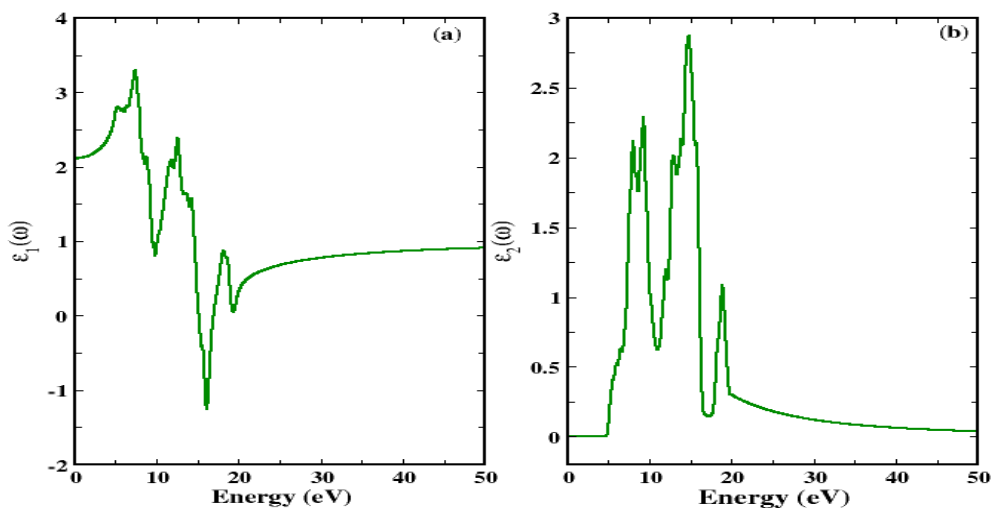
$$R(\omega) = \frac{|\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1|^2}{|\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1|^2} \quad (8)$$

دالة فقد الطاقة:

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_1(\omega)}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega)} \quad (9)$$

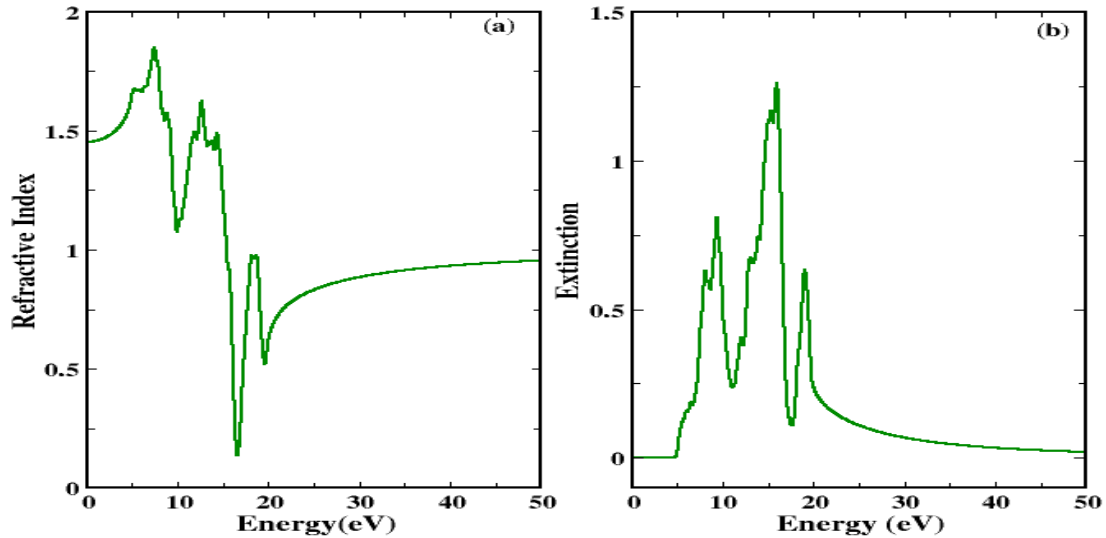
وقد أجريت حسابات الخصائص البصرية باستخدام تقريب الكثافة المحلية (LDA) ضمن اطار برنامج *siesta*، حيث درست في هذا البحث الخصائص البصرية مثل دالة العزل، ومعامل الانكسار، ومعامل الخمود، والانعكاسية، والامتصاصية، ودالة فقد الطاقة لمركب كلوريد السيزيوم في الطور البلوري B2 وقد تم التحقق من النتائج ومقارنتها بالأعمال النظرية المتوفرة، إذ توضح الأشكال المختلفة حسابات الخصائص البصرية كدالة في طاقة الفوتون بوحدات الإلكترون فولت والمشتقة من دالة العزل الكهربائي المركبة.

تمثل المنحنيات في الشكلين 2(a)، 2(b) الجزأين الحقيقي والتخيلي لدالة العزل الكهربائي لمركب كلوريد السيزيوم وذلك ضمن مدى الطاقة من 0eV إلى 50eV. استنادا إلى شكل 3(a)، الذي يمثل الجزء الحقيقي لدالة العزل الكهربائي، تصل قيمة ثابت العزل الكهربائي الساكن $\varepsilon_1(0)$ إلى 2.12 وتتفق هذه القيمة مع الدراسة السابقة (Bingol et al., 2015b)، مع وجود اختلاف بسيط يمكن ارجاعه إلى اختلاف تقريبات التبادل والارتباط، كما يمتد نطاق التشتت الطبيعي والانتقالات بين الحزم من حتى نحو 14eV متضمن عدة قيم متذبذبة، وينخفض المنحنى بشدة نحو قيم سالبة بين 14eV و 19eV حول مواضع انعدام الجزء الحقيقي، حيث تتطابق عندها دالة فقد الطاقة، مما يجسد منطقة التشتت الشاذ وأثرات البلازمون الجماعية، قبل أن يستقر تدريجياً نحو القيمة واحد في النطاقات عالية الطاقة. أما بالنسبة لجزء التخيلي شكل 3(b)، يلاحظ انعدام أي امتصاص بصري تماماً خلال نطاق طاقة الفوتون الممتد من 0 إلى نحو 5eV أي بعد أن تتجاوز طاقة الفوتون الساقط فجوة الطاقة للمركب، وبعد ذلك تظهر في منطقة الأشعة فوق بنفسجية عدة قمم بارزة للانتقالات الإلكترونية من حزم التكافؤ إلى حزم التوصيل داخل مدى الطاقة يتراوح بين 7eV و 16eV، حيث تقع أقصى قمة امتصاص عند طاقة تقدر بحوالي 14.5eV، ويعقبها بعد ذلك قمم أخرى واضحة ضمن نطاق 18eV إلى 20eV. ويعتبر تقريب GGA المستخدم في الدراسة السابقة (Bingol et al., 2015b)، مشابهاً لتقريب LDA في كلا التقريبين في اظهار الخصائص الكيفية العامة للأطياف البصرية لكلوريد السيزيوم، إلا أن هناك فروق كمية طفيفة وبالأخص ثابت العزل الكهربائي الساكن ومواقع القمم الأساسية في دالتي ε_1 و ε_2 ذات انزياحات طفيفة ويرجع ذلك إلى الفروق المعروفة بين التقريبين في حساب كثافة الإلكترونات والتدرجات وقيم طاقات الفجوة.



شكل رقم (2): يوضح الدالة العزل الكهربائي لمركب كلوريد السيزيوم

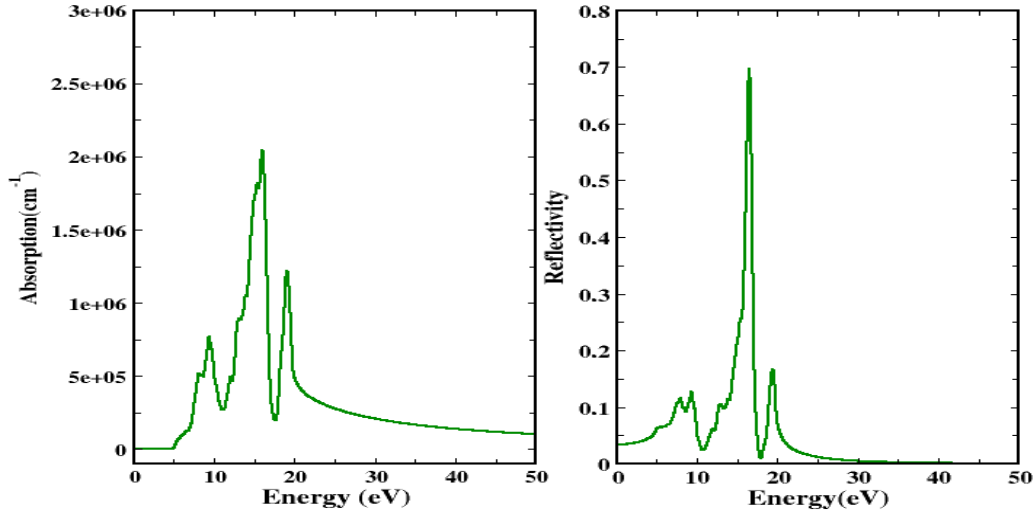
يبين منحنى معامل الانكسار في الشكل (a) أن القيمة الساكنة تقع عند 1.45 عند طاقة الصفر، كما يرتفع المنحنى ليبلغ نحو 1.9 عند طاقة 7eV، ثم ينخفض بشدة بين الطاقات 16eV و 20eV نحو قيم منخفضة أقل من الواحد حول مواضع انعدام الصفر، قبل أن يستقر بشكل تدريجي تقريباً عند القيمة واحد في النطاقات ذات الطاقة العالية. وبالمقابل، يظهر منحنى معامل الخمود في الشكل (b) أن قيمته تساوى صفر في نطاق الطاقات المنخفضة، ثم يرتفع بشكل حاد مكوناً مجموعة من القمم العظمية البارزة الناتجة عن الانتقالات بين الحزم بين طاقات 7eV و 21eV لتتلاشى تدريجياً نحو الصفر عند النطاقات العالية. وبمقارنة هذه النتائج مع الدراسة السابقة (Bingol et al., 2015b) يظهر تطابق في السلوك العام للمنحنيات وتتابع القمم البصرية مع وجود اختلافات طفيفة في بغض القيم العددية، مثل القيمة الساكنة لمعامل الانكسار التي بلغت في الدراسة السابقة نحو 2.37، وهي انزيمات كمية ناتجة عن الفروق الطيفية في البرمجيات أو طرق معالجة تقريبات التبادل والتفاعل LDA مقابل GGA وتحسينات فجوة الطاقية.



شكل رقم (3): يوضح معامل الانكسار ومعامل الخمود لمركب كلوريد السيزيوم

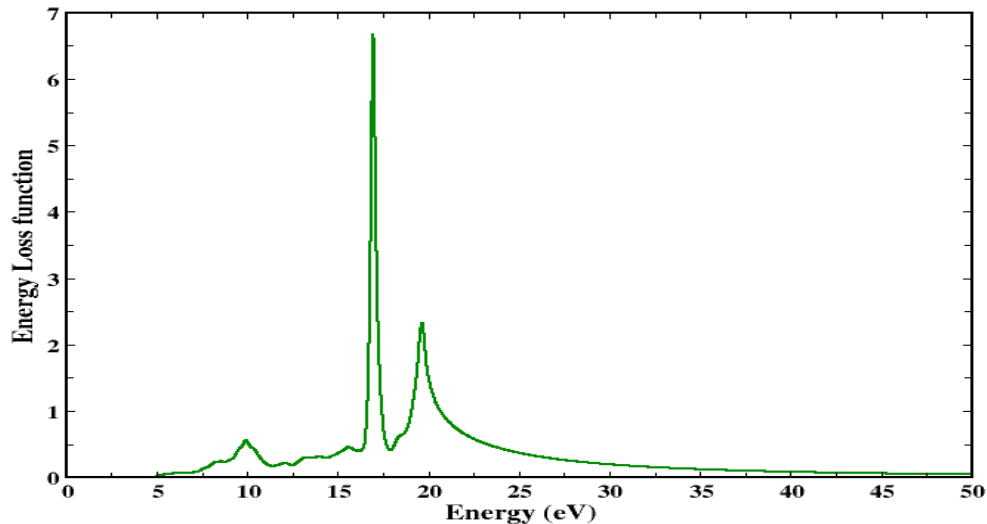
يعرض الشكل (4) منحنى الامتصاصية والانعكاسية لمركب كلوريد السيزيوم كدالة لطاقة الفوتون حتى مدى 50eV، حيث نلاحظ أن قيمة الامتصاص تساوى صفر عند الطاقات المنخفضة أقل من طاقة الفجوة للمركب مما يدل على الشفافية التامة للمادة ضمن المدى المرئي، ثم يرتفع المنحنى بشكل حاد مشكلاً سلسلة من قمم الامتصاص البارزة في المدى من 7eV الي 20eV، أقصاها تقدر بحوالي $20 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ ناتجة عن الانتقالات الإلكترونية بين حزم التكافؤ والتوصيل، قبل أن تتناقص قيم الامتصاص تدريجياً نحو القيم المنخفضة مع ارتفاع الطاقات نحو المناطق العالية. وعلى الجانب الآخر، تبدأ الانعكاسية بقيم منخفضة عند الطاقات الصغيرة، ثم تبدأ في الصعود التدريجي مع وجود طفرات صغيرة وتموجات قبل أن يصعد المنحنى ليسجل قنة انعكاس حادة وعظمية تبلغ 0.7 اي يعادل 70% عند طاقى تقدر بحوالي 16eV تتبعها قمم أخرى أصغر قرب طاقة 19eV، لتتناقص الانعكاسية بشكل سريع بعد نتجاوز طاقة 20eV وتستقر بجانب القيم القريبة من الصفر في نطاقات الطاقة العالية.

يتفق التحليل الحالي لمنحنى الامتصاصية والانعكاسية مع ما جاء في دراسة (Bingol et al., 2015b). فيما يخص السلوك الفيزيائي العام، حيث يتفقان في انعدام الامتصاص تماماً دون حدود فجوة الطاقة مما يؤكد شفافية المادة في المدى المرئي، الى جانب ظهور طفرات وقمم عظمية متقاربة ضمن نطاقات بين 7eV و 20eV ناتجة عن الانتقالات الإلكترونية بين الحزم مع اضمحلال تدريجي نحو الصفر في الطاقات العالية، بينما تكمن الاختلافات في فروقات كمية طفيفة بين القيم العظمى للامتصاص ونسب الانعكاسية التي ترجع الى الاختلافات الحسابية الدقيقة في اعدادات البرمجية المستخدمة بالدراسة المرجعية.



شكل رقم (4): يوضح الامتصاصية والانعكاسية لمركب كلوريد السيزيوم

يوضح الشكل (5) منحنى دالة فقد الطاقة لمركب كلوريد السيزيوم كدالة في طاقة الفوتون في المدى $[0 - 50\text{eV}]$ ، حيث تبدأ قيم الدالة من الصفر في مدى الطاقات المنخفضة وتتجه لمحاذاة القيم الصغرى مع وجود تموجات طفيفة، ثم تصعد بشكل حاد مشكلة قمة عظمية تقدر بـ 6.7 عند طاقة 17eV يعقبها قمة أخرى ثانية أقل ارتفاعاً وحدة تبلغ نحو 2.3 عند طاقة 19.5eV، ليرجع لتوجات البلازما وتفاعلات فقد الطاقة السطحية والحجمية للإلكترونات السريعة المتضمنة في دالة العزل، لتهدأ القيم بعد ذلك بسرعة وتختفي تدريجياً متجهة نحو الاستقرار قرب الصفر في مناطق الطاقات العالية. تتجسد أوجه التشابه بين الدراسة الحالية ودراسة (Bingol et al., 2015b) في السلوك العام والمظهر الطيفي لمنحنى دالة فقد الطاقة الحجمية حيث يبدأ بتموجات صغرى في نطاق الطاقات المنخفضة، ثم يصعد بحده ليسجل قمماً مترابطاً مع ترددات البلازما، ويتبع ذلك اضمحلال وتناقص تدريجي باتجاه الصفر في مناطق الطاقات العالية في 30eV، مع توافق في ظهور قمم فقد الطاقة مع مواضع انعدام الجزء الحقيقي لدالة العزل تبعاً للتفاعلات البلازماوية، في حين تتمثل أوجه الاختلاف في القيم الكمية والدقة العددية في ارتفاع القمم وطاقات الفوتون، والتي تعود إلى اختلافات منهجية تتجسد في اعتماد الدراسة الراهنة على تقريب LDA، في مقابل استخدام تقريب GGA في الدراسة المرجعية.



شكل رقم (5): يوضح دالة فقد الطاقة لمركب كلوريد السيزيوم

الخاتمة:

تسلط هذه الدراسة الضوء على الخصائص الإلكترونية والبصرية لمركب كلوريد السيزيوم في الطور B₂ حيث تمت الحسابات النظرية اعتماداً على برمجية siesta وتقريب الكثافة المحلية LDA. وقد أسفرت النتائج عن تصور للطيف الإلكتروني وتوزيع الحالات الإلكترونية، موضحة طبيعة التداخل بين حالات Cs-6s و Cl-3p، التي جانب توضيح طبيعة الفجوة الإلكترونية. وعلى الصعيد البصري، تم تحليل ومناقشة الخصائص البصرية بدلالة طاقة الفوتون الساقط، والمتمثلة

في الجزء الحقيقي والتخيلي، ومعامل الانكسار، ومعامل الخمود، ومعامل الامتصاص، والانعكاسية، إضافة الي دالة فقد الطاقة ضمن النطاق الطاقى [0 - 50eV]، مع الأخذ بعين الاعتبار الانتقالات الإلكترونية بين النطاقات. وبناء على تلك النتائج تأكدت الصفة العازلة لمركب كلوريد السيزيوم، حيث تبدأ عمليات الانتقال والتهيج الإلكتروني عند حد فجوة الطاقة في حين تتطابق القيم المرصودة ضمن طيف فقد طاقة الإلكترونات مع ترددات البلازما للمركب. وبمقارنة هذه النتائج مع الدراسة المرجعية التي استخدمت برمجية ABINIT وتقريب التدرج المعمم GGA، يظهر تطابق واضح في السلوك العام والمظهر الطيفي للمنحنيات بينما ترجع الفروق الكمية الطفيفة في قيم الطاقات وارتفاعات القيم الي التفاوتات المنهجية المتمثلة في استخدام تقريب LDA عبر برمجية siesta، مقابل تقريب GGA وبرمجية ABINIT. وتعزز هذه النتائج فهم السلوك البصري لمركبات الهاليدات القلوية، مما يجعلها بيانات مرجعية للتطبيقات الالكترونية والبصرية المستقبلية.

قائمة المراجع:

1. Ambrosch-Draxl, C., & Sofo, J. O. (2006). Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method. *Computer Physics Communications*, 175(1), 1–14.
2. Bingol, S., Erdinc, B., & Akkus, H. (2015a). Electronic band structure, optical, dynamical and thermodynamic properties of cesium chloride (CsCl) from first-principles. *International Journal for Simulation and Multidisciplinary Design Optimization*, 6, A7. <https://doi.org/10.1051/smdo/2015007>
3. Ceperley, D. M., & Alder, B. J. (1980). Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method. *Physical Review Letters*, 45(7), 566–569. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.566>
4. Gleason, G., Ch, B. E., Shaw, J., & Arbor, A. (1964). Myocardial administration infarction of cesium-131.
5. Group, E. A. (2006). Progress on High Efficiency Photocathodes for Soft X-ray EUV and FUV photon detection.pdf. 2006, 51–58.
6. Li, S., Qiao, D., Wang, C., Wu, X., Wang, H., Zhang, C., Zhang, L., Cao, C., & Wu, H. (2024). First principles study on the mechanical properties and generalized stacking fault energy of CsCl, CsBr and CsI. *Applied Physics A*, 130(8), 551. <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07705-2>
7. Materials, A., Andr, L., Supervisors, E. L., & Sapienza, L. (2013). Theoretical Description of the Optical Properties of Nanostructures Within Time Dependent Density Functional Theory.
8. Naeemullah, Murtaza, G., Khenata, R., Reshak, A. H., Naeem, S., & Khalid, M. N. (2014). Insulator to metal transition and optical response of CsCL under pressure. *International Journal of Modern Physics B*, 28(6), 1–11. <https://doi.org/10.1142/S0217979214500477>
9. Ordejón, P., Artacho, E., & Soler, J. M. (1996). Self-consistent order density-functional calculations for very large systems. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 53(16), R10441–R10444. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.R10441>
10. Rothwell, D. C. (1974). By THE REQUIREMENTS FOR THE DEGREE OF in the Department GEOGRAPHY required standard. *Geography*.
11. States, U. (1981). Reprinted from. 62(3), 1–5.
12. Szabo, Z., Park, G.-H., Hedge, R., & Li, E.-P. (2010). A unique extraction of metamaterial parameters based on Kramers–Kronig relationship. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 58(10), 2646–2653.