

Estudio de las propiedades electrónicas y ópticas del superconductor $\text{Sm}_{3x}\text{Y}_{3(1-x)}\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{18}$ mediante el método LAPW+lo

T. Santillán-Gómez, F. Puch Ceballos, M.L. Pérez-Arrieta

En este trabajo se presenta un cálculo de las propiedades electrónicas y ópticas, de la familia de superconductores de alta temperatura crítica ($T_c > 90$ K) $\text{Sm}_{3x}\text{Y}_{3(1-x)}\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{18}$ ($\text{Sm}_{3x}\text{Y}_{3(1-x)}58$), para $0 \leq x \leq 1$, así como las de $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (Y123) y las de $\text{Sm}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (Sm123), realizado utilizando el método de primeros principios LAPW+lo (por sus siglas en inglés, *linearized augmented plane wave + local orbitals*), dentro de la teoría DFT (*density functional theory*). La densidad de estados electrónicos (DOS, Density of States) y la conductividad óptica se calculan para cuatro estructuras cristalinas generadas al variar x (para $x = 0; 1/3; 2/3; 1$). El objetivo fue determinar la DOS (parcial y total) y la conductividad óptica a bajas energías. En particular el efecto de los orbitales f del Sm cerca de la energía de Fermi (E_f). Se encontró que al sustituir átomos de Sm por los de Y, la DOS total se ve afectada alrededor de E_f , debido a la contribución de los orbitales f del Sm. Cuando el sistema cuenta con dos átomos de Y y uno de Sm (Sm_1Y_258), el valor de la DOS total en la E_f aumenta 547 % con respecto al compuesto Y358, Cuando el sistema cuenta con 2 átomos de Sm y uno de Y (Sm_2Y_158), el valor de la DOS total en la E_f aumenta 1043 % con respecto al compuesto Y358. Mientras que para el caso del Sm358, aumenta 1432 %. Para el Sm123 y Sm358 la conductividad óptica presenta un pico cercano al origen. Mientras que para el Y358 no presenta ningún pico en la conductividad y presentando valores muy bajos cerca al origen. Para los casos $x=1/3$ y $2/3$ encontramos que la conductividad se ve modificada cerca del origen. El valor más alto ocurre para el sistema que contiene dos átomos de Sm, esto fue a 0.14 eV.

Study of electronic and optical properties of $\text{Sm}_{3x}\text{Y}_{3(1-x)}\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{18}$ superconductor using the LAPW+lo method

Abstract

This work presents a calculation of the electronic and optical properties of the family of high critical temperature superconductors ($T_c > 90$ K) $\text{Sm}_{3x}\text{Y}_{3(1-x)}\text{Ba}_5\text{Cu}_8\text{O}_{18}$ ($\text{Sm}_{3x}\text{Y}_{3(1-x)}58$), para $0 \leq x \leq 1$, as well as those of $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (Y123) and those of $\text{Sm}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (Sm123), carried out using the first principles method LAPW+lo (linearized augmented plane wave + local orbitals), within the DFT theory (density functional theory). The Density of Electronic States (DOS) and optical conductivity are calculated for four crystal structures generated by varying x (for $x = 0; 1/3; 2/3; 1$). The objective was determined. DOS (partial and total) and optical conductivity at low energies. In particular the effect of the *f orbitals* of Sm near the Fermi energy (E_f). It was found that by substituting Sm atoms for Y atoms, the total DOS is affected around E_f due to the contribution of the Sm f orbitals. When the system has two atoms of Y and one of Sm (Sm_1Y_258). The value of the total DOS in the E_f increases 547% with respect to the compound Y358. When the system has 2 atoms of Sm and one of Y (Sm_2Y_158), the value of the total DOS in the E_f increases 1043% with respect to the compound Y358. While in the case of Sm358, it increases 1432%. For Sm123 and Sm358 the optical conductivity presents a peak near the origin. While for Y358 it does not present any peak in conductivity and presents very low values near the origin. For the cases $x = 1/3$ and $2/3$ we find that the conductivity is modified near the origin. The highest value occurs for the system containing two Sm atoms, this was at 0.14 eV.

Introducción

La superconductividad de alta temperatura crítica fue descubierta por Bednorz y Müller en 1986 [1], quienes sintetizaron los compuestos metálicos deficientes en oxígeno en el sistema Ba-La-Cu-O. Con la composición $\text{Ba}_x\text{La}_{5-x}\text{Cu}_5\text{O}_{5(3-y)}$ (para $x=1$ y 0.7 ; $y>0$), se obtuvo la T_c más alta en el rango de los 30 K, hasta ese momento en este tipo de compuestos. Posteriormente los materiales más estudiados que han brindado una alta T_c son $\text{Re}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (Re123) donde Re=Y, Sm, entre otras tierras raras; estos materiales tienen una temperatura de transición alrededor de los 90 K. Las propiedades electrónicas de Re123 fueron calculadas en 2013 [2], utilizando métodos de primeros principios. En particular, se determinó la DOS total y la asociada a los diferentes escenarios presentes en estos sistemas. Los resultados obtenidos mostraron que los orbitales f del Nd y Sm tienen un efecto importante en la DOS total de los sistemas Nd123 y Sm123 por encima de la E_f . La temperatura de

transición se podría cambiar mediante sustitución química, por un exceso de contenido de oxígeno o por la adición de impurezas [3]. También, en estos superconductores la investigación se ha centrado principalmente en incrementar la temperatura de transición, de estos cupratos, mediante dopaje o aumento del número de planos efectivos de CuO_2 (Figura 1). En año 2010 [4] se realizaron experimentos para sintetizar nuevas fórmulas estequiometría en la familia YBaCuO con mayor T_c . Se sintetizaron usando el método estándar

Tomás Santillán-Gómez , Felipe Puch Ceballos, María Leticia Pérez-Arrieta 

Unidad Acad. de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas Zacatecas, Zac. 98060, México.

Received: February 27th, 2023

Accepted: June 4th, 2024

Published: June 28th, 2024

© 2024 by the authors. Creative Commons Attribution

https://doi.org/10.47566/2024_syv37_1-240601

de reacción en estado sólido para los materiales Y5-6-11, Y7-9-16, Y5-8-13, Y7-11-18, Y156, Y3-8-11, Y13-20-33; De los que el Y358, Y5-8-13 y el Y3-8-11 han mostrado la mayor T_c , alrededor de 94 K. Aliabadi *et al.* [5], sintetizaron los superconductores Y123 e $Y_3Ba_5Cu_8O_{18}$ registrando la T_c de 90 K para el Y123 y de 102 K para el Y358. Aliabadi también encontró que al aumentar el número de planos de CuO2 y también la posición de las cadenas de CuO tienen importantes efectos sobre el valor de la temperatura de transición en el compuesto Y358.

En el 2011 Topal [6, 7] mostró que el exceso de oxigenación en las muestras RE358 no tiene impacto significativo en los valores de T_c . Las propiedades características de estas composiciones difieren de la fase RE123, en la que se puede observar la superconductividad a 90 K incluso sin oxigenación. También en 2011 [8] se obtuvieron muestras de Y123 y Y358 en donde se obtuvieron de manera certera los parámetros de red para Y358. En ese mismo año mediante muestras de $RE_3Ba_5Cu_8O_{18}$ ($RE=Y, Sm$ o Nd) obtenidas por Topal [9], se confirmó que cristalizan en una estructura ortorrómbica, aumentando el volumen de la celda unitaria a medida que Sm y Nd reemplazan a Y . En estudios recientes [10], se han sintetizado los superconductores $La_3Ba_5Cu_8O_{18-\delta}$, $Sm_3Ba_5Cu_8O_{18-\delta}$ y $RE_3Ba_5Cu_8O_{18}$ ($RE = Dy, Gd, Ho, Sm, Y, Yb$) mediante el método de reacción de estado sólido y el método de combustión. De estos estudios se desprende que todos estos superconductores cristalizan en una estructura ortorrómbica. Los estudios magnéticos también han revelado que estos tipos de materiales registran una transición superconductor dependiente de la tierra rara y la temperatura de transición decrece con el incremento del radio iónico de la tierra rara [11]. También se han realizado estudios de levitación magnética [12, 13], se encontró que la fuerza de levitación magnética es mayor para los materiales RE358 que para los RE123 lo cual favorece los futuros estudios en los materiales RE358 [12].

Tavana y Akavan [14], realizaron cálculos de estructura electrónica con la teoría DFT del compuesto Y358. Investigaron la evolución del número de portadores y huecos, en los diferentes sitios de los planos de CuO2 y las cadenas de CuO en comparación con los compuestos Y123, Pr123, Y124 e Y247. Concluyeron dos cosas para este tipo de sistemas: 1) dopar los planos con huecos adicionales puede mejorar la T_c ; 2) la disminución del número de huecos en las cadenas favorece la T_c . En otras palabras, se deben bombear más huecos de las cadenas a los planos para obtener un superconductor de mayor T_c en la familia YBCO.

Los RE123 y RE358 tienen semejanzas cristalinas: el RE123 tiene una estructura cristalina ortorrómbica simple, cruenta con una cadena CuO y dos planos CuO2, mientras que el RE358 tiene tres cadenas CuO y cinco planos CuO2 (ver Figura 1) [15, 16]. El grupo de simetrías es el $Pmm2$ cuyo número de operaciones de simetría es de 4; la identidad y de reflexión en los tres planos paralelos a los ejes coordenados pasando por el centro. La estructura ortorrómbica para el RE358 se muestra en la Figura 1.

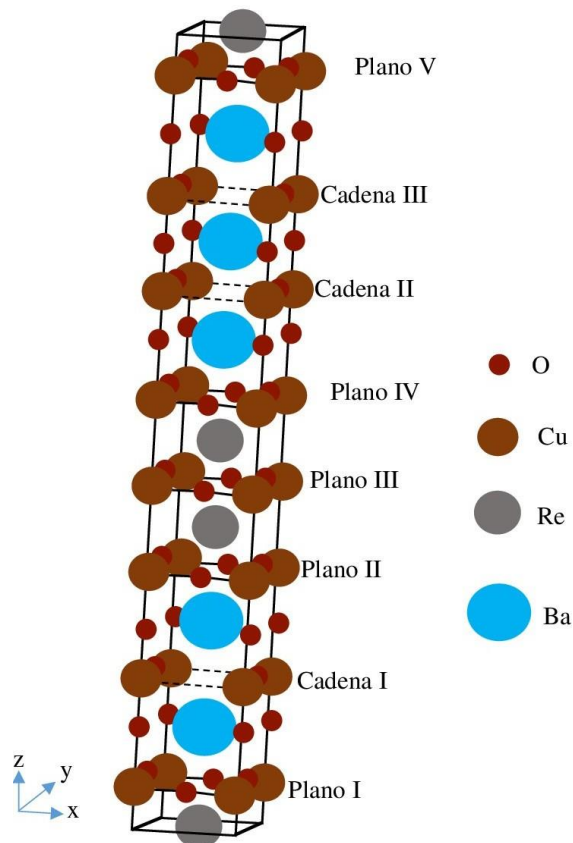


Figura 1. Estructura ortorrómbica para el RE358. Donde en las posiciones Re se pueden colocar átomos Y o de Sm. Un plano contiene dos átomos de O y uno de Cu de la celda base, mientras que una cadena contiene un átomo de O y uno de Cu de la celda base.

Como se puede observar en la Figura 1 los planos de Cu-O, se encuentran más cerca de los átomos de Sm por lo que serán sus primeros vecinos, a diferencia de las cadenas de Cu-O, serían los terceros o cuartos vecinos y los átomos de Ba segundos y terceros vecinos.

Debido a que los compuestos Y358 cuando es dopado por iones de Sm, presentan muy buenas propiedades superconductoras a una alta T_c , el propósito de esta investigación es presentar las propiedades electrónicas y las propiedades ópticas de la familia $Sm_{3x}Y_{3(1-x)}O_{58}$. En particular, se analiza la contribución de los orbitales f de los iones Sm en la DOS totales, en las DOS parciales en los planos y cadenas de CuO y en las propiedades ópticas, al sustituirlos por átomos de Sm en el superconductor Y358. El análisis se realizó alrededor de la energía de Fermi.

Método Computacional

Todos los cálculos fueron realizados utilizando el código WIEN 2K [17], el cual está basado en la teoría del funcional de densidad (DFT). El código emplea una base de ondas lineales planas aumentadas a las cuales se le agregan orbitales locales (Linearized Augmented Plane Wave + local orbitals, LAPW+lo). Se utilizó la aproximación de gradiente generalizado de Perdew y Burke de 1996 [18] para el potencial de intercambio-

correlación. La energía de separación entre el núcleo y los estados de valencia se fijó en 6.0 Ry. Los parámetros RKmax, Lmax, Gmax se fijaron igual a 7.0, 10 y 14, respectivamente. El número de puntos k utilizados para hacer el muestreo en la primera zona de Brillouin es de 200. Se seleccionó la base LAPW+lo para los orbitales *d* de los átomos de Cu, y para los orbitales *f* y *d* del átomo de Sm, para tener una convergencia más efectiva. Para todos los demás orbitales atómicos, se utilizó la base LAPW. El radio *muffin tin* se fijó igual a 2.35, 2.44, 2.5, 1.75, y 1.55 para los átomos Y, Sm, Ba, Cu y O, respectivamente. Además de la convergencia en energía (0.0001 Ry). Los parámetros de red para las diferentes celdas se calcularon utilizando la ley de Vegard [19, 20], a partir de los parámetros de los sistemas Y358 y Sm358 la cual para nuestro caso quedo expresada de la siguiente forma:

$$a(x) = xa_{BX} + (1-x)a_{AX} \quad (1).$$

La ley de Vegard asume que ambos componentes A y B en su forma pura (es decir, antes de mezclar) tienen la misma estructura cristalina. Aquí, $a(x)$ es el parámetro de red de la solución, a_{BX} y a_{AX} son los parámetros de red de los constituyentes puros, y x es la fracción molar de B en la solución. Los valores de los parámetros de red obtenidos con la ley de Vegard, para los casos estudiados, se muestran en la Tabla 1.

La función dieléctrica $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ caracteriza las propiedades ópticas de un material [21]. Esta función se obtiene del espectro de reflectancia correspondiente. La parte real e imaginaria, $\epsilon_1(\omega)$ y $\epsilon_2(\omega)$, de la función dieléctrica están relacionadas a través de las relaciones de Kramers-Kronig. La parte imaginaria $\epsilon_2(\omega)$ puede ser expresada en términos de la conductividad óptica $\sigma(\omega)$ de la siguiente manera:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega} \quad (2)$$

Para transiciones interbandas, $\sigma(\omega)$ está dada por la fórmula Kubo-Greenwood:

$$\sigma_{ij}(\omega) = -\frac{\pi e^2 \hbar^2}{m^2 \omega \Omega} \times$$

$$\sum_{l,m} \int dK P_{ln}^i P_{nl}^j f_n(\mathbf{k}) [1 - f_l(\mathbf{k})] \delta(E_1(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k}) - \hbar\omega) \quad (3)$$

donde:

$$P_{ln}^i = \left\langle \psi_l(\mathbf{k}) \left| \frac{\partial}{\partial x_i} \right| \psi_n(\mathbf{k}) \right\rangle \quad (4)$$

es la matriz de transición óptica. $\psi_n(\mathbf{k})$ es la función de Bloch para la *n*-ésima banda y el vector de onda \mathbf{k} . $E_n(\mathbf{k})$ es la energía correspondiente a esa banda, $f(\mathbf{k})$ es la función de distribución de Fermi-Dirac, ω es la frecuencia de la radiación y Ω es el volumen de la celda. Estos cálculos ópticos se realizaron con el paquete OPTIC incluido en el código Wien2k [21].

Resultados y discusión

Con la finalidad de comprobar la correcta implementación del método, se reproducen la DOS total de RE123. Debido a que RE123 y RE58 poseen

Tabla 1. Parámetros de red de $Sm_{3x}Y_{3(1-x)}58$ cuando $x = 1/3$ y $x = 2/3$, calculados utilizando la ley de Vegard para los casos $x = 0$ y 1 .

Parámetro de Red (Å)	$x = 0$ (Y358)	$x = 1/3$	$x = 2/3$	$x = 1$ (Sm358)
A	3.8571	3.8622	3.8672	3.8723
b	3.9206	3.9206	3.9207	3.9207
c	31.2882	31.2871	31.2760	31.2699

escenarios cristalinos similares así como sus distancias interatómicas son las mismas. La densidad de estados total de Y123 y Sm123 calculadas en este trabajo coincide con lo reportado en la literatura [2,22]. En las gráficas de las DOS de este trabajo (Figura 2), el cero se fija en la energía de Fermi (E_f). La DOS total para el Y123 y Sm123 son parecidas, con excepción de las cercanías a E_f , donde se observa un máximo debido a la contribución de los orbitales *f* del Sm en el Sm123. Para los sistemas de interés $Sm_{3x}Y_{3(1-x)}58$ las posiciones relativas de los átomos se muestran en la Tabla 2.

La DOS total alrededor de la E_f para los sistemas Sm358 y Y358 se muestran en la Figura 3a. El pico que se observa en el Sm358 en la E_f , es debido a la contribución de los orbitales *f* de los tres átomos de Sm. Este pico no aparece en el Y358. En la Figura 3b se muestran las contribuciones parciales a la DOS de los orbitales *f* del

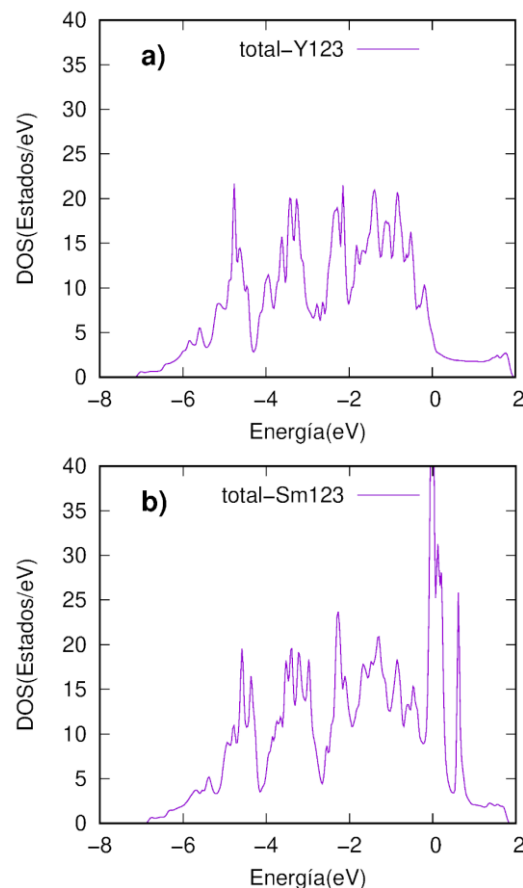


Figura 2. Densidad de estados totales para Y123 (a) y Sm123 (b). La E_f se localiza en cero.

Tabla 2. Posiciones relativas para los átomos de la celda unitaria de Re358.

átomo	x	y	z	átomo	x	y	z
Cu(PI)	0	0	0.0545	Cu(CI)	0	0	0.1833
O(PI)	0.5	0	0.0459	O(CI)	0	0.5	0.1883
O(PI)	0	0.5	0.0459	Cu(CII)	0	0	0.6742
Cu(PII)	0	0	0.3221	O(CII)	0	0.5	0.6749
O(PII)	0.5	0	0.3307	Cu(CIII)	0	0	0.7932
O(PII)	0	0.5	0.3307	O(CIII)	0	0.5	0.7932
Cu(PIII)	0	0	0.4313	Re1	0	0	0
O(PIII)	0.5	0	0.4313	Ba1	0.5	0	0.1225
O(PIII)	0	0.5	0.4313	O	0	0	0.1288
Cu(PIV)	0	0	0.5404	Ba2	0.5	0.5	0.2586
O(PIV)	0.5	0	0.5318	O	0	0	0.2478
O(PIV)	0	0.5	0.5319	Ba3	0.5	0.5	0.6087
Cu(PV)	0	0	0.9454	O	0	0	0.615
O(PV)	0.5	0	0.954	Ba4	0.5	0.5	0.7337
O(PV)	0	0.5	0.954	O	0	0	0.7337
RE2	0.5	0.5	0.3767	Ba5	0.5	0.5	0.8711
RE3	0.5	0.5	0.4859	O	0	0	0.8711

RE=Sm o Y; PI: plano I; CI: cadena I; etc.

Sm; donde se observa, que estas son el origen del pico que se registra.

Para construir los casos intermedios Sm_1Y_258 y Sm_2Y_158 en la familia $Sm_{3x}Y_{3(1-x)}58$ se sustituyeron iones de Y o Sm con la finalidad de obtener el valor x deseado. Por

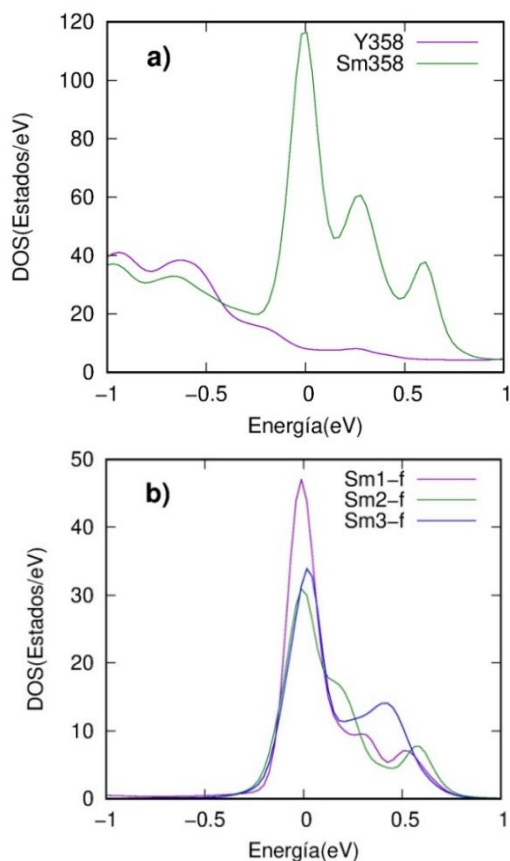


Figura 3. Densidad de estados total para Y358 y Sm358 (a). DOS parciales para los orbitales f de los átomos de Sm para Sm358 (b).

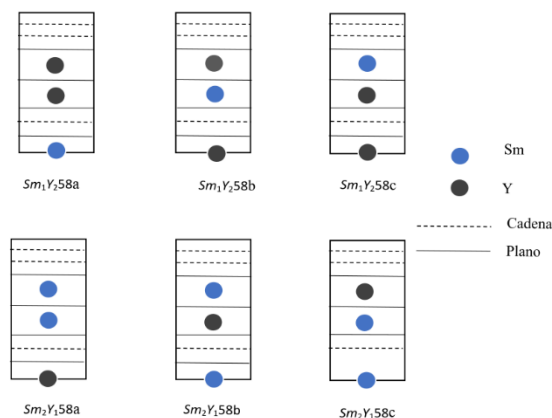


Figura 4. Diferentes configuraciones para la sustitución de Y por Sm, en los casos intermedios Sm_1Y_258 y Sm_2Y_158 .

ejemplo para el caso $x = 1/3$ que es el superconductor Sm_1Y_258 es tomar la celda base del Y358 y cambiar un ionde Sm por uno de Y. Es importante notar que esta sustitución genera tres configuraciones diferentes debido a las tres posibles posiciones que puede ocupar el Sm las diferentes configuraciones se caracterizan acorde a la Figura 4.

La DOS alrededor de la E_f , para los casos intermedios cuando $x = 1/3$ y $2/3$ se muestran en la Figura 5. Si se compara con los casos $x = 0$ y $x = 1$, se puede observar situaciones intermedias a los casos $x = 0$ y 1, donde el pico

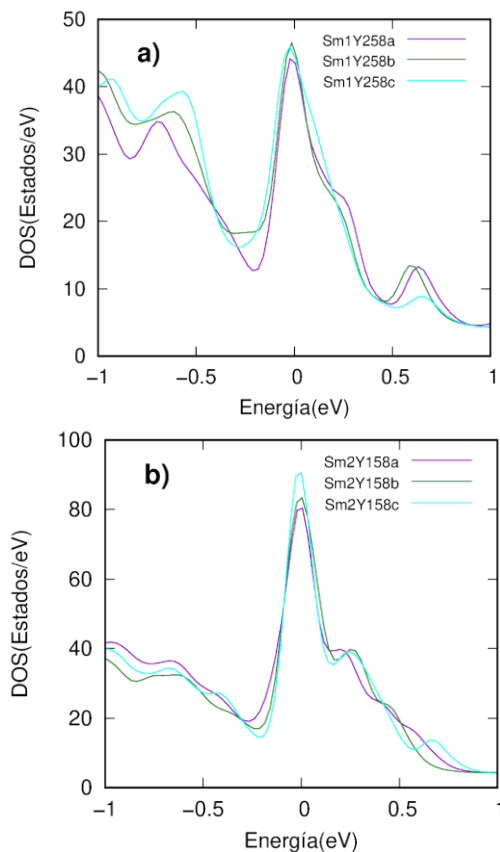


Figura 5. Densidad de estados total para Sm_1Y_258 (a), y Sm_2Y_158 (b) alrededor de la E_f .

Tabla 3: DOS total en la E_f de los diferentes sistemas estudiados.

x	Sistema	DOS (Estados/eV)	<DOS> (Estados/eV)
0	Y358	8.116	8.116
	Sm ₁ Y ₂ 58a	43.623	
1/3	Sm ₁ Y ₂ 58b	45.372	44.417
	Sm ₁ Y ₂ 58c	44.257	
	Sm ₂ Y ₁ 58a	80.211	
2/3	Sm ₂ Y ₁ 58b	83.155	84.659
	Sm ₂ Y ₁ 58c	90.613	
	Sm ₃ 58	116.213	

más alto lo presentan los sistemas Sm_2Y_158 el cual implica 2 átomos de Sm y uno de Y. Para el caso Sm_1Y_258 , se aprecian alteraciones a ambos lados de la energía de Fermi. Por ejemplo, la disminución sustancial alrededor de los 0.632 eV, para el escenario Sm_1Y_258c . Y cómo en el escenario Sm_1Y_258a , el lado de menor energía difiere a los escenarios b y c; Para el caso Sm_2Y_158 , en el escenario c, el pico alrededor de los 0.653 eV desaparece.

DOS en la energía de Fermi

Con la finalidad de tener una estimación del número de portadores posibles en el estado superconductor, es necesario tener la DOS total en la energía de Fermi, la cual se muestra para los diferentes sistemas izquierda de la Tabla 3. Para poder tener un valor con respecto a x promediamos los que tienen el mismo valor de x , es decir para los sistemas intermedios, cuando el valor de $x = 1/3$ se promedian los sistemas Sm_1Y_258a , Sm_1Y_258b , y Sm_1Y_258c , y cuando $x = 2/3$ se promedian los sistemas Sm_2Y_158a , Sm_2Y_158b , y Sm_2Y_158c .

En la Tabla 3 en la última columna se ve que si se cambia un átomo de Y por uno de Sm, en Y358, el valor de la DOS total en la E_f aumenta a 547 %, si se cambian 2 átomos de Y por 2 Sm aumenta a 1043 % y si se cambian los 3 átomos aumenta a 1432 %. Este aumento en la DOS total parece tener un efecto secundario en T_c , ya que ambos sistemas Sm358 e Y358 poseen una temperatura crítica similar.

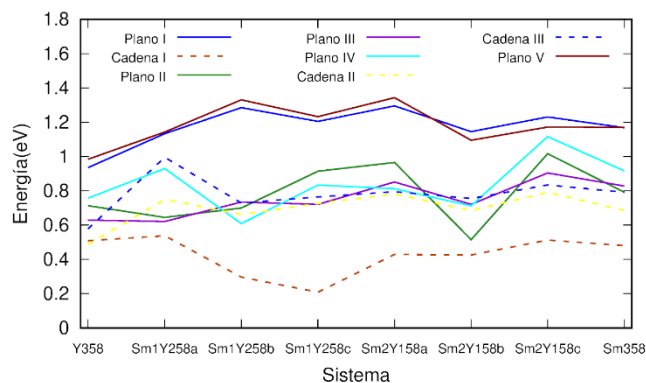


Figura 6. DOS parcial en los diferentes planos y cadenas de los diferentes sistemas obtenidos al variar la composición x .

DOS parciales en la E_f en los planos y cadenas

En la Figura 6 se muestra un comparativo de las DOS parciales para las cadenas y planos de los superconductores $Sm_{3x}Y_{3(1-x)}58$. Los valores de la DOS parcial en los diferentes sistemas para el plano I y V son muy similares debido a que los vecindarios cristalinos son similares: ambos planos tienen como primeros vecinos a una RE y a un Ba, como segundos vecinos a una cadena y un plano. Lo mismo sucede con los escenarios locales de las cadenas II y III, y los planos II y IV. Algo diferente ocurre para la cadena I y plano III: estos escenarios no cuentan con vecindades como las descritas anteriormente, y en consecuencia las DOS parciales difieren a las asociadas las otras cadenas y planos. En la mayoría, la DOS parcial es mayor para el Sm358, lo cual debe esperarse dada la

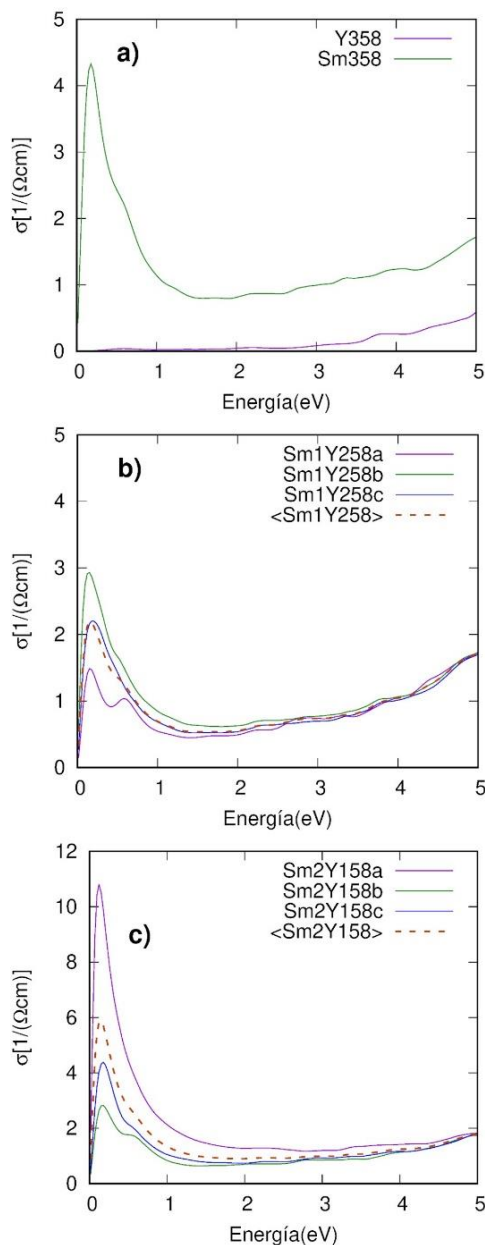


Figura 7. Conductividad óptica de los materiales Y358 (a) y los casos intermedios Sm_1Y_258 (b) y Sm_2Y_158 (c).



diferencia sustancial en la DOS total. Para los sistemas Sm_1Y_258 y Sm_2Y_158 se podría esperar una situación similar, en lo general, el número de portadores de carga disponible se mantiene, y contribuirán de manera similar en el estado superconductor para estos sistemas. La contribución de los planos y cadenas en cada material en la E_f es de 5.594, 6.569, 6.698 y 6.832 Estados/eV para Y358, Sm_1Y_258 , Sm_2Y_158 , y Sm358 respectivamente. Por lo que estas contribuciones se ven afectadas un 22.1% para Sm358 con respecto al Y358.

Propiedades ópticas

Con la DOS parciales y total pueden ser calculadas diferentes propiedades del material, como por ejemplo las propiedades ópticas [23] que pueden compararse con su contraparte experimental. En la Figura 7 se muestra la conductividad óptica (σ) para la familia $Sm_{3x}Y_{3(1-x)}58$, donde se puede observar un pico en el sistema Sm358 cerca al origen, mientras que el sistema Y358 no presenta ninguna pico y los valores de la conductividad son muy bajos incluso a 2 eV. Para los casos Sm_1Y_258 y Sm_2Y_158 se observa que la conductividad también cuenta con un pico cerca del origen, presentando el valor más alto el sistema Sm_2Y_158 en 0.14 eV. Es importante señalar que la diferencia de valor de Sm_2Y_158 , en donde la configuración si afecta de manera significativa el valor de la conductividad, aunque no la forma cualitativa.

Conclusions

Los resultados muestran que los orbitales f del Sm son los responsables del pico de la DOS total de Sm358 cerca de la E_f , mientras que para los sistemas intermedios, es decir los Sm_1Y_258 y Sm_2Y_158 , suceden situaciones intermedias, cuantos más átomos de Sm tengamos, la DOS total incrementa alrededor de la E_f .

Por otra parte, las DOS parciales de los planos y cadenas son afectadas en cada configuración del $Sm_{3x}Y_{3(1-x)}58$ aunque de manera diferente: los cambios más importantes ocurren para la cadena I y plano III, sin embargo, solo en una configuración la variación en la magnitud no va más allá del 50%. Los valores de las DOS parciales de los planos I y V, planos II y IV y las cadenas II y III son parecidos en la región cercana a la E_f , esto es debido a la similitud de su entorno físico. También se encuentra que la DOS total de los sistemas intermedios $x = 1/3$ y $x = 2/3$, depende del lugar donde se realice la sustitución de los átomos de Sm ó Y en la estructura cristalina.

Debido a que la DOS total es afectada cerca de la E_f , las conductividades ópticas de los sistemas, Sm_1Y_258 ,

Sm_2Y_158 y Sm358 presentan un máximo cerca de cero, siendo el pico más alto en la conductividad óptica para el superconductor Sm_2Y_158 esto fue a 0.14 eV, mientras que para el Y358 no presenta ningún pico y sus valores son muy bajos en la conductividad incluso a 2 eV.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico de CONAHCYT.

References

- [1]. J.G. Bednorz, K.A. Müller, system. *Z. Phys., B Condens. Matter* **64**, 189 (1986).
- [2]. F. Puch-Ceballos, J. Aguilar-Sánchez, H. Tototzintle-Huit le, *Superficies y Vacío* **26**, 84 (2013).
- [3]. M. Yi, Y. Zhang, Z.-X. Shen, D. Lu, *NPJ Quantum Mater.* **2**, 57 (2017).
- [4]. P. Udomsamuthirun, T. Kruaehong, T. Nilkamjon, S. Rateng, *J. Supercond. Nov. Magn.* **23**, 1377 (2010).
- [5]. A. Aliabadi, Y.A. Farshchi, M. Akhavan, *Phys. C: Supercond. Appl.* **469**, 2012 (2009).
- [6]. U. Topal, M. Akdogan, *J. Supercond. Nov. Magn.* **25**, 239, (2012).
- [7]. H. Khosroabadi, M. Rasti, M. Akhavan, *Phys. C: Supercond. Appl.* **497**, 84, (2014).
- [8]. S. Gholipour, V. Daadmehr, A. Rezakhani, H. Khosroabadi, F.S. Teh-rani, R.H. Akbarnejad, *cond-mat.supr-con*, 0893, (2011).
- [9]. U. Topal, M. Akdogan, H. Ozkan, *J. Supercond. Nov. Magn.* **24**, 2099 (2011).
- [10]. C.A. Parra Vargas, C.C. Canarfa-Camargo, J. Roa-Rojas, J. Albino-Aguilar, *Rev. Acad. Colomb. Cienc. Ex. Fis. Nat.* **45**, 83 (2021).
- [11]. U. Guerrero, A.M. Morales-Rivera, J.A. Gómez Cuaspu, J. Munevar, C.A. Parra-Vargas, *Mater. Res.* **24**, 1980 (2021).
- [12]. S. Kutuk, S. Bolat, *AIP Conf. Proceed.* **2042**, 020033 (2018).
- [13]. S. Kutuk, S. Bolat, *J. Mater. Sci.* **57**, 1198 (2022).
- [14]. A. Tavana, M. Akhavan, *Eur. Phys. J. B* **73**, 79 (2010).
- [15]. D. Landínez Téllez, M. Cabrera Baez, J. Roa-Rojas, *Mod. Phys. Lett. B* **26**, 1250067 (2012).
- [16]. A. Wilson, *Acta Cryst. A* **44**, 715, (1988).
- [17]. P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, R. Laskowski, F. Tran, L.D. Marks, *User's Guide WIEN2k 23.1 (Release Jan 16th, 2023)*.
- [18]. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865, (1996).
- [19]. L. Vegard, *Z. Phys.* **5**, 17, (1921).
- [20]. A.R. Denton, N.W. Ashcroft, *Phys. Rev. A* **43**, 3161, (1991).
- [21]. C. Ambrosch-Draxl, J.O. Sofo, *Comput. Phys. Commun.* **175**, 1 (2006).
- [22]. G. Guo, W. Temmerman, *Phys. Rev. B* **41**, 6372, (1990).
- [23]. P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G.K. Madsen, L.D. Marks, *J. Chem. Phys.* **152**, 074101 (2020).