
Índice general

Dedicatoria	I
Agradecimientos	II
Pensamiento	III
Resúmen	IV
Índice de tablas	VIII
Índice de figuras	IX
1. Introducción	1
1.1. Problemática mundial: consumo energético vs reservas limitadas de petróleo, proyecciones futuras	1
1.2. Motivación a la investigación de tecnologías limpias	6
1.3. Las Celdas de combustible: una alternativa	8
1.4. Motivación de esta Tesis	14
1.5. Hipótesis	19
1.6. Objetivo General	19
1.7. Objetivos específicos	19
2. Conceptos básicos de química cuántica	20
2.1. La ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos	20
2.2. La teoría del funcional de la densidad	25
2.3. Las ecuaciones de Kohn-Sham	30

2.3.1. Electrones sin interacción	31
2.3.2. Electrones con interacción	32
3. Estructuras cristalinas básicas	35
3.1. El espacio recíproco	38
3.1.1. La celda de Wigner-Seitz	39
3.2. Manejo de estructuras moleculares	41
4. Metodología	45
4.1. Reformulación	45
4.1.1. Aleaciones de tipo Pt_xA_y	46
4.1.2. Aleaciones de tipo $Pt_xA_yB_z$	46
4.1.3. Aleaciones de tipo $Pt_xSn_yRu_zMo_w$	47
4.2. Características de las superficies catalíticas y el software Abinit	48
5. Generalidades de los algoritmos evolutivos	50
5.1. Algoritmo evolutivos	50
5.2. Algoritmo Genético	52
5.2.1. Inicialización	52
5.2.2. Operador de Selección	54
5.2.3. Operador de Cruce	55
5.2.4. Operador de Mutación	56
5.3. Pseudocódigo del Algoritmo Genético	57
6. Resultados	59
6.1. Análisis de convergencia del AG	59
6.2. Bash y el manejo de softwares Abinit-Octave-C++	67
6.3. Resultado de las simulaciones	72
6.3.1. Estructuras de la forma Pt_xA_y	75
6.3.2. Estructuras de la forma $Pt_xA_yB_z$	76
6.3.3. Estructuras de la forma $Pt_xSn_yRu_zMo_w$	78
6.4. Resultados experimentales vs simulación	82
Conclusión	85

Perspectivas	87
A. Catálisis Heterogénea	88
A.1. Catálisis Heterogénea	88
A.1.1. Adsorción superficial	90
B. Preliminares matemáticos	92
B.1. Teoría de probabilidad básica	92
B.2. Matrices no negativas	96
B.3. Relaciones de orden y cadenas de Markov	99
B.4. Clasificación de estados y cadenas absorbentes	105
B.5. Eigenvalores	113
B.6. Espacios producto interno y algunas propiedades importantes	114
B.7. Propiedades del producto tensorial	117
C. Generalidades de la optimización	119
C.1. Modelación matemática	119
C.2. Optimización y metaheurísticas	120
D. Principios de mecánica cuántica y métodos de función de onda	124
D.1. Operadores y funciones propias	131
D.2. Determinantes de Slater	134
D.2.1. Determinación de los coeficientes C_k	136
D.3. Métodos configuracionales	139
D.3.1. El funcional de intercambio-correlación	139
E. Fundamentos sobre periodicidad de las estructuras cristalinas	144
E.1. El teorema de Bloch	144
E.1.1. Condiciones de frontera periódicas	147
E.2. Planos cristalinos e índices de Miller	149
E.3. Parámetro de corte <i>cutoff</i>	152
E.4. Pseudopotenciales	154
Bibliografía	158