

Tabla de Contenido

1. Introducción	1
1.1. Objetivos	2
1.2. Alcances	2
2. Antecedentes	3
2.1. Celdas de combustible	3
2.1.1. Calor en funcionamiento	4
2.1.2. Fabricación y aplicaciones	4
2.2. Materiales cerámicos	6
2.3. Perovskitas	7
2.3.1. Variaciones en micro estructura de perovskitas	8
2.3.2. Dopaje de perovskitas	9
2.4. Radios iónicos de Shannon	11
2.5. Factores de tolerancia de perovskitas	12
2.5.1. Factor de Tolerancia de Goldschmidt (FTG)	12
2.5.2. Nuevo factor de tolerancia (NFT)	13
2.5.2.1. Probabilidad de formación	13
2.6. Ciencia de datos en materiales	15
3. Metodología	16
3.1. Perovskitas a estudiar	16
3.2. Nuevo Factor de Tolerancia	18
3.3. Ponderación de propiedades atómicas	18
3.4. Algoritmo base	20
3.5. Software a utilizar	22
3.6. Esquema de trabajo	23
3.6.1. Revisión bibliográfica	23
3.6.2. Preparación de software	24
3.6.3. Trabajo computacional	24
3.6.4. Validación	24
3.6.5. Resultados finales	25
4. Resultados y discusión	26

4.1.	Análisis en detalle del esquema original	26
4.2.	Desarrollo de código	29
4.2.1.	Compuestos de estudio	29
4.2.2.	Variación composicional	30
4.2.3.	Cálculo de factores de tolerancia	34
4.2.4.	Formato de archivos	35
4.2.5.	Archivo de porcentajes de formación	37
4.2.6.	Conclusiones finales de etapa de desarrollo de código	38
4.2.6.1.	Multiprocesamiento	38
4.3.	Validación de resultados	40
4.3.1.	Comparación de resultados	40
4.3.2.	Análisis de muestras	41
4.4.	Resultados finales: Base de datos generada	44
4.4.1.	Formato y contenidos de archivos	45
4.4.2.	Enlace de repositorio	47
4.4.3.	Instrucciones de uso de base de datos	47
4.4.4.	Indicaciones de archivo Resultados.py	48
4.4.4.1.	Consideraciones	48
5.	Conclusión	49
5.1.	Proyecciones y posibles trabajos futuros	50
	Bibliografía	50
	Anexo A. Códigos computacionales python	53
A.1.	Resultados y discusión	53
A.1.1.	Funciones editadas de PredictPerovskites.py	53
A.1.2.	Resultados.py	59
A.1.3.	ResultadosMP.py	65
A.1.4.	Comparacion.py	72
A.1.5.	Muestras.py	76