

# Tabla de contenido

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	1
1.1	Hidrógeno como combustible sostenible	1
1.2	Radiación solar	4
1.3	Celdas fotoelectroquímicas	6
<b>2</b>	<b>Fundamentos teóricos</b>	9
2.1	Termodinámica en procesos electroquímicos	9
2.1.1	Espontaneidad en una reacción electroquímica	9
2.1.2	Ecuación de Nernst	10
2.1.3	Energía libre de Gibbs de formación estándar y electrodo de hidrógeno estándar	11
2.1.4	Función de energía libre de Gibbs en soluciones no ideales	12
2.2	Diagramas de Pourbaix	13
2.2.1	Condiciones de equilibrio	14
2.2.2	Campo de estabilidad del agua y representación en diagrama de Pourbaix	15
2.2.3	Método de minimización de energía libre de Gibbs	16
2.3	Diagramas de Latimer	17
2.4	Diagramas de Frost	18
2.5	Materiales semiconductores	19
2.5.1	Modelo de bandas y tipos de semiconductores	19
2.5.2	Función de distribución de Fermi-Dirac	22
2.6	Proceso de electrodeposición	23
<b>3</b>	<b>Estado del arte</b>	25
3.1	Cobre	26
3.1.1	Especies de Cu en solución acuosa	27
3.1.2	Sulfato de cobre	27
3.2	Zinc	28
3.2.1	Especies de Zn en solución acuosa	29
3.2.2	Sulfato de zinc	30
3.3	Tiourea (TU)	31
3.4	Sulfuro de cobre	32
3.4.1	Diagramas de Pourbaix del sistema cobre-azufre en solución acuosa	32
3.4.2	Electrodeposición de $Cu_xS$	34
3.5	Sulfuro bimetálico cobre-zinc	35
3.6	Objetivos	37
<b>4</b>	<b>Metodología</b>	38
4.1	Planificación	38
4.2	Base de datos termodinámicos	39
4.3	Generación de sistemas	40
4.3.1	Planteamiento de semirreacciones para sistemas simples	40
4.3.2	Planteamiento de semirreacciones para sistemas multielementos	42
4.4	Codificación y simulación	45

4.4.1 Planteamiento de cálculos termodinámicos para sistemas simples .....	45
4.4.2 Planteamiento de cálculos termodinámicos para sistemas multielementos.....	47
4.4.3 Algoritmo de determinación de la mínima energía libre de Gibbs .....	50
<b>5 Resultados y discusión .....</b>	<b>53</b>
5.1 Estabilidad de las especies pivotes.....	53
5.1.1 Determinación de las especies pivotes de azufre .....	53
5.1.2 Determinación de las especies pivotes de cloro .....	55
5.2 Diagrama de Pourbaix del sistema cobre y azufre en solución.....	57
5.2.1 Comparación del sistema Cu-S-H <sub>2</sub> O mediante la adición de tiourea .....	60
5.3 Diagrama de Pourbaix del sistema zinc y azufre en solución acuosa .....	62
5.4 Diagrama de Pourbaix del sistema cobre, zinc y tiourea en solución acuosa .....	63
5.5 Discusión general.....	66
<b>6 Conclusiones y recomendaciones .....</b>	<b>68</b>
<b>Bibliografía .....</b>	<b>69</b>
<b>Anexos .....</b>	<b>72</b>
A. Datos termodinámicos.....	72
B. Cálculos termodinámicos .....	75
B.1. Potenciales de reducción para diagramas de Latimer y de Frost.....	75
B.1.1. Azufre.....	75
B.1.2. Cloro .....	75
B.2 Cálculo de potencial estándar en medio básico a partir del potencial estándar en medio ácido.....	76
C. Código Matlab.....	78
C.1. Código del sistema cobre, tiourea, cloro y agua.....	78
C.2. Código del sistema zinc, azufre, cloro y agua .....	84
C.3. Código del sistema azufre y agua .....	89
C.4. Código del sistema cloro y agua.....	91
D. Diagramas Hydra&Medusa.....	94