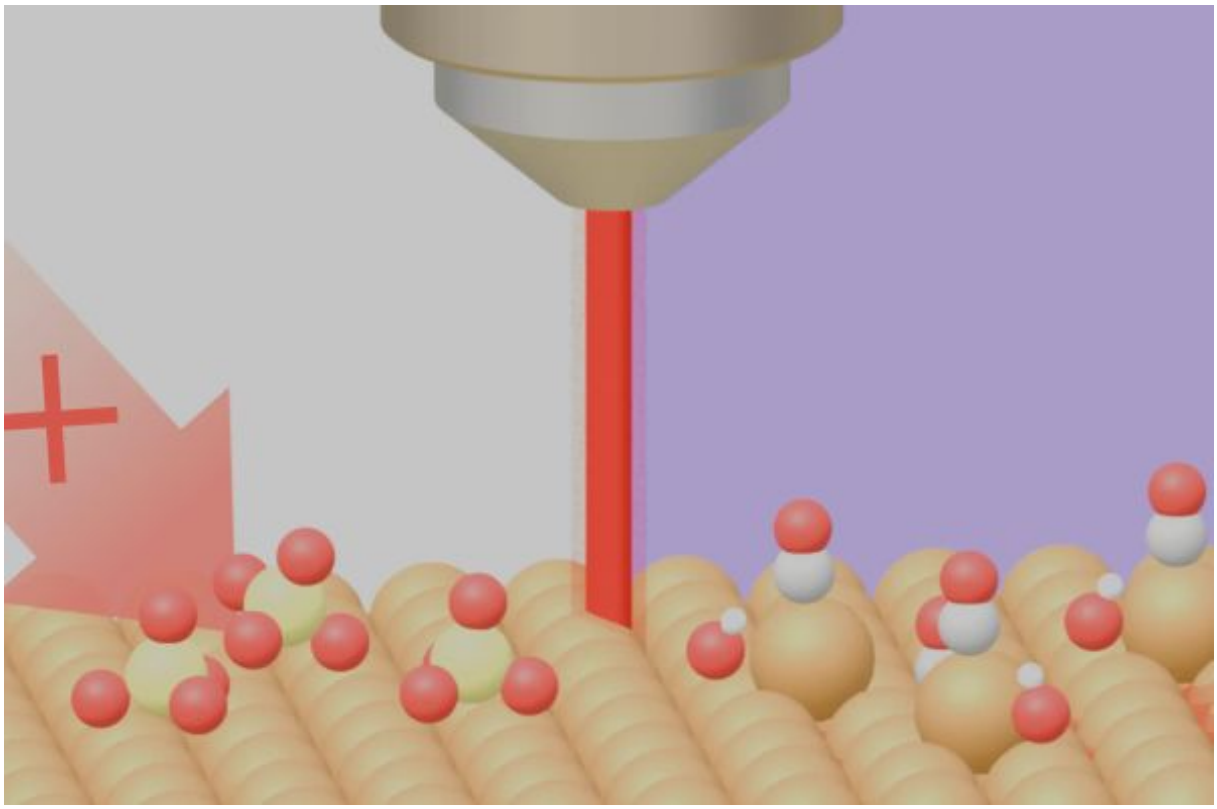

El doble rol dels anions en la conversio de CO? en acid

Tradicionalment, no s'ha explorat gaire quin paper juguen els anions (particules amb carrega negativa) a l'hora de convertir el dioxid de carboni (CO?) en productes quimics utils en un entorn acid.

En una publicacio de JACS, investigadors de l'ICFO i l'ICIQ han demostrat ara que els anions influeixen activament en l'electroreduccio de CO?. En concret, aquests dificulten la produccio dels compostos desitjats a baixos corrents electrics, pero estabilitzen progressivament els productes intermedis clau per a la seva formacio a mesura que el corrent augmenta.

May 11, 2026

El dioxid de carboni (CO?) es ampliament conegut com un dels gasos d'efecte hivernacle mes comuns. S'han proposat diverses accions per reduir-lo i fins i tot convertir-lo en productes quimics utils, amb l'objectiu de mitigar l'efecte hivernacle i, alhora, aprofitar l'excedent de CO? per generar compostos de rellevancia industrial.

La reduccio electroquimica de CO? (CO?R) en medis acids ha sorgit recentment com una estrategia prometedora. Aquesta complexa reaccio depen de molts factors ambientals i implica diversos compostos intermedis, tant amb carrega positiva com negativa. Els cations, com el potassi i el cesi, han estat ampliament estudiats, i la majoria dels experts ja coincideixen a dir que el seu paper es crucial pel correcte desenvolupament de la reaccio. Els **anions**, tot i que tambe hi son presents en forma de sulfats i hidroxils, no han rebut tanta atencio i la seva funcio encara no es compren del tot.

No obstant aixo, evidencies recents suggereixen que els anions estan lluny de ser especies passives i poden modular activament el rendiment de la CO?R. Investigadors de l'ICFO, l' **Adrian Pinilla-Sanchez**, la **Dra. Barbara Polesso**, en **Prathama Haldar**, en **Ranit Ram**, el **Dr. Anku Guha**, dirigits pel **Professor F. Pelayo Garcia de Arquer,** han ampliat aquest coneixement, revelant com aquestes particules amb carrega negativa influeixen en la conversio del CO? en medis acids i sota condicions industrialment rellevants. L'estudi, publicat al Journal of the American Chemical Society i realitzat en estreta col·laboracio am l'Institut d'Investigacio Quimica de Catalunya (ICIQ), combina espectroscopia Rama millorada en superficiein situ amb simulacions computacionals (Teoria del Funcional de la Densitat Gran Canonica).

Aquesta estrategia, que compagina metodes experimentals i teorics, ha demostrat inequivocament que el paper dels anions depen tant del pH (mostrant que com mes acides son les condicions, mes intensos son els efectes observats) com de la quantitat de corrent electric que flueix a traves de la cel·la electroquimica

A **baixos corrents**, els sulfats i els hidroxils s'adhereixen fortament a la superficie de l'electrode, **bloquejant els llocs actius** on el CO? normalment s'uniria i iniciaria el seu proces de conversio. Pero a **corrents mes alts**, s'incrementa la carrega negativa a la superficie de l'electrode, la qual cosa repel·leix els anions, especialment els sulfats. Aixo **debilita la forca d'unio dels sulfats**, fent que eventualment s'allunyin dels llocs actius. En el seu lloc, els intermedis de fase primerenca i el monoxid de carboni (*CO), un intermedi clau per a la formacio de productes amb multiples carbonis, s'adsorbeixen, cosa que permet que comenci la reduccio de CO?. Alhora, molts hidroxils, generats in situ per les reaccions en curs i menys afectats per la repulsio electroestatica a causa de la seva menor carrega negativa, romanen a prop de l'electrode. La seva presencia **estabilitza el *CO**, facilitant aixi les reaccions quimiques que finalment produeixen els compostos desitjats.

En conjunt, aquesta investigacio aporta llum sobre com els **anions**, fins ara poc explorats, afecten la CO?R, revelant que son **actors estrategics mes que no pas passius**. Segons l'equip, aquests coneixements podrien guiar el disseny dels sistemes de CO?R en acid que encara s'han de desenvolupar.

Referencia:

Adrian Pinilla-Sanchez, Suraj Panja, Barbara Polesso, Prathama Haldar, Ranit Ram, Ranga

Rohit Seemakurthi, Anku Guha, Nuria Lopez, and F. Pelayo Garcia de Arquer, Interfacial Adsorbate Competition Regulates Intermediate Stabilization and Onset Potential in Acidic CO2 Electroreduction, Journal of the American Chemical Society **2026** 148 (9), 10026-10036
DOI: 10.1021/jacs.5c22970

Agraiments:
ICFO thanks the Fundacio Cellex, Fundacio Mir-Puig, the La Caixa Foundation (100010434, E.U. Horizon 2020 Marie Sk?odowska-Curie grant agreement 847648); the European Union (NASCENT, 101077243). From the Spanish Ministry of Science and Innovation (MCIN/AEI/10.13039/501100011033/), we thank PID2022-138127NA-I00, RED2024-154266-T; A.P.S. acknowledges PRE2021-098995 and FSE+, A.G. acknowledges JDC2023-052976-I, B.B. acknowledges FSE (PRE2019-088522). and S.P., R.R.S., and N.L. acknowledge PID2024-157556OB-I00, funded by MCIU/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE, and Severo Ochoa Excellence Accreditation CEX2024-001469-S funded by MCIU/AEI/10.13039/501100011033. R.R.S. acknowledges funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Sk?odowska-Curie grant agreement no. 754510. We acknowledge EuroHPC Joint Undertaking for awarding us access to MareNostrum5 at BSC, Spain. The Barcelona Supercomputing Center (BSC-RES) is further acknowledged, for providing generous computational resources and technical support, as well as Generalitat de Catalunya CERCA.