



El doble rol dels anions en la conversio de CO₂ en acid

Tradicionalment, no s'ha explorat gaire quin paper juguen els anions (partícules amb carrega negativa) a l'hora de convertir el diòxid de carboni (CO₂) en productes químics útils en un entorn acid.

En una publicació de JACS, investigadors de l'ICFO i l'ICIQ han demostrat ara que els anions influeixen activament en l'electroreducció de CO₂. En concret, aquests dificulten la producció dels compostos desitjats a baixos corrents elèctrics, però estableixen progressivament els productes intermedis clau per a la seva formació a mesura que el corrent augmenta.

May 11, 2026

El diòxid de carboni (CO₂) és àmpliament conegut com un dels gasos d'efecte hivernacle més comuns. S'han proposat diverses accions per reduir-lo i fins i tot convertir-lo en productes químics útils, amb l'objectiu de mitigar l'efecte hivernacle i, alhora, aprofitar l'excedent de CO₂ per generar compostos de rellevància industrial.

La reduccio electroquimica de CO_2 (CO_2R) 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 això, evidencies recents suggereixen que els anions estan lluny de ser especies passives i poden modular activament el rendiment de la CO_2R . 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_2 en medis acids i sota condicions industrialment rellevants. L'estudi, publicat al Journal of the American Chemical Society i realitzat en estreta col·laboracio amb l'Institut d'Investigacio Quimica de Catalunya (ICIQ), combina espectroscopia Rama millorada en superficie in situ amb simulacions computacionals (Teoria del Funcional de la Densitat Gran Canonica).

Aquesta estrategia, que compagina metodes experimentals i teorics, ha demostrat inequívocament que el paper dels anions depen tant del pH (mostrant que com mes acids 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_2 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. Això **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 ($^*\text{CO}$), un intermedi clau per a la formacio de productes amb multiples carbonis, s'adsorbeixen, cosa que permet que comenci la reduccio de CO_2 . Alhora, molts hidroxils, generats in situ per les reaccions en curs i menys afectats per la repulsió electroestatica a causa de la seva menor carrega negativa, romanen a prop de l'electrode. La seva presencia **estabilitza el $^*\text{CO}$** , 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_2R , revelant que son **actors estrategics mes que no pas passius**. Segons l'equip, aquests coneixements podrien guiar el disseny dels sistemes de CO_2R 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 Skłodowska-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 Skłodowska-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.