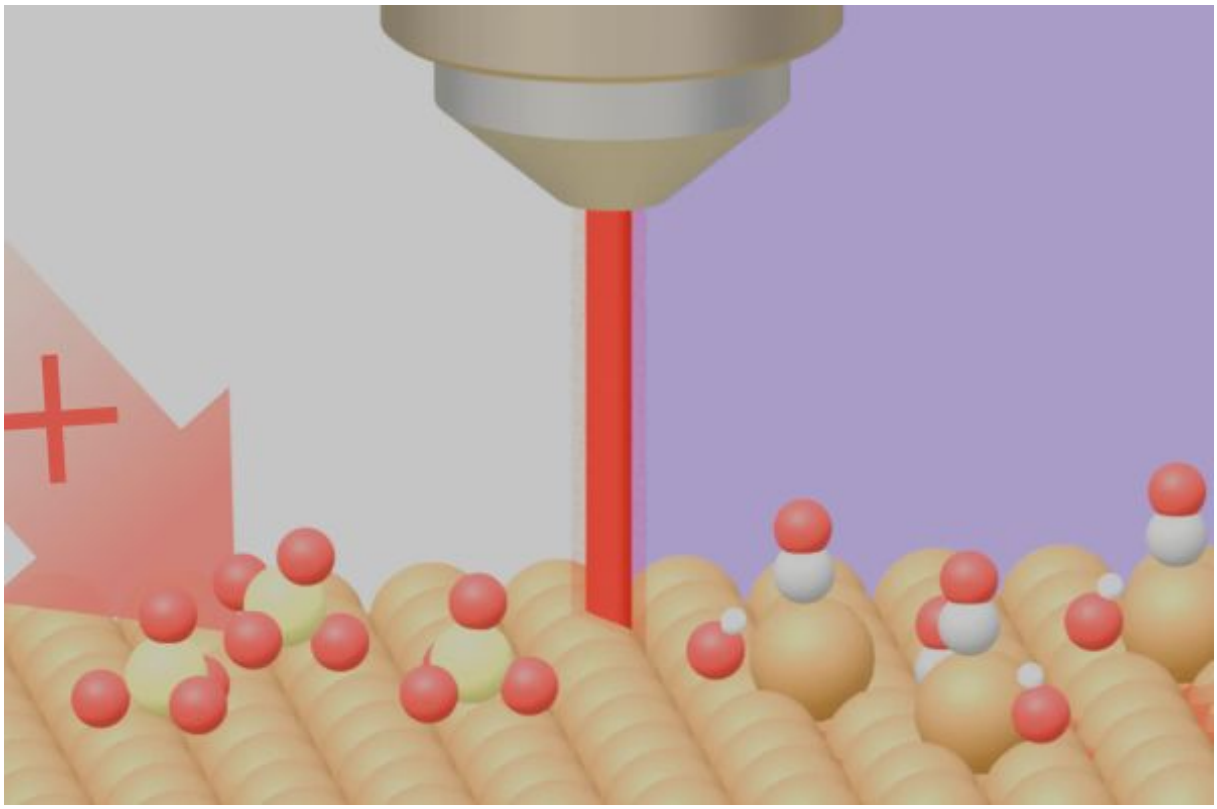

El doble rol de los aniones en la conversion de CO? en acido

Tradicionalmente, no se ha explorado demasiado que papel juegan los aniones (particulas con carga negativa) a la hora de convertir el dioxido de carbono (CO?) en productos quimicos utiles en un entorno acido.

En una publicacion de JACS, investigadores del ICFO y el ICIQ han demostrado ahora que los aniones influyen activamente en la electroreduccion de CO?. En concreto, estos dificultan la produccion de los compuestos deseados a bajas corrientes electricas, pero estabilizan progresivamente los productos intermedios clave para su formacion a medida que la corriente aumenta.

May 11, 2026

El dioxido de carbono (CO?) es ampliamente conocido como uno de los gases de efecto invernadero mas comunes. Se han propuesto diversas acciones para reducirlo e incluso convertirlo en productos quimicos utiles, con el objetivo de mitigar el efecto invernadero y,

al mismo tiempo, aprovechar el excedente de CO? para generar compuestos de relevancia industrial.

La reduccion electroquimica de CO? (CO?R) en medios acidos ha surgido recientemente como una estrategia prometedora. Esta compleja reaccion depende de muchos factores ambientales e implica varios compuestos intermedios, tanto con carga positiva como negativa. Los cationes, como el potasio y el cesio, han sido ampliamente estudiados, y la mayoria de los expertos ya coinciden en que desempenan un papel crucial para el correcto desarrollo de la reaccion. Los **aniones**, aunque tambien estan presentes en forma de sulfatos e hidroxilos, no han recibido tanta atencion y su funcion todavia no se comprende del todo. Sin embargo, evidencias recientes sugieren que los aniones estan lejos de ser especies pasivas y pueden modular activamente el rendimiento de la CO?R. Investigadores del ICFO, **Adrian Pinilla-Sanchez**, la **Dra. Barbara Polesso**, **Prathama Haldar**, **Ranit Ram**, el **Dr. Anku Guha**, dirigidos por el **Profesor F. Pelayo Garcia de Arquer,** han ampliado este conocimiento, revelando como estas particulas con carga negativa influyen en la conversion de CO? en medios acidos y bajo condiciones industrialmente relevantes. El estudio, publicado en el Journal of the American Chemical Society y realizado en estrecha colaboracion con el Instituto de Investigacion Quimica de Cataluna (ICIQ), combina espectroscopia Raman mejorada en superficie in situ con simulaciones computacionales (Teoria del Funcional de la Densidad Gran Canonica).

Esta estrategia, que une metodos experimentales y teoricos, ha demostrado inequivocamente que el papel de los aniones depende tanto del pH (demostrando que cuanto mas acidas son las condiciones, mas intensos son los efectos observados) como de la cantidad de corriente electrica que fluye a traves de la celda electroquimica.

A bajas corrientes, los sulfatos y los hidroxilos se adhieren fuertemente a la superficie del electrodo, **bloqueando los sitios activos** donde el CO? normalmente se uniria e iniciaria su proceso de conversion. Pero **a corrientes mas altas**, la mayor carga negativa en la superficie del electrodo repele a los aniones, especialmente a los sulfatos. Esto **debilita la fuerza de union de los sulfatos**, haciendo que eventualmente se alejen de los sitios activos. En su lugar, los intermedios de etapa temprana y el monoxido de carbono (*CO), un intermedio clave para la formacion de productos con multiples carbonos, se adsorben, permitiendo que comience la reduccion de CO?. Al mismo tiempo, muchos hidroxilos, generados in situ por las reacciones en curso y menos afectados por la repulsion electrostatica debido a su menor carga negativa, permanecen cerca del electrodo. Su presencia **estabiliza el *CO**, facilitando asi las reacciones quimicas que finalmente producen los compuestos deseados.

En conjunto, esta investigacion arroja luz sobre como los **aniones**, hasta ahora poco explorados, afectan la CO?R, revelando que son **actores estrategicos mas que pasivos**. Segun el equipo, estos conocimientos podrian guiar el diseno de los sistemas de CO?R en acido que aun estan por desarrollar.

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

Agradecimientos:

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.