

2025 年 9 月 1 日

国立大学法人東北大学
国立大学法人北海道大学
AZUL Energy 株式会社**青色顔料を用いた多層構造の炭素系材料が****CO₂ 資源化に有効であることを発見**

— カーボンリサイクルを促進し、地球温暖化抑制への貢献に期待 —

【発表のポイント】

- 人工知能（AI）を活用した大規模データ解析により、二酸化炭素（CO₂）資源化触媒として 220 種類の候補物質の中から青色顔料のコバルトフタロシアニン（CoPc）が最適であることを見出しました。
- カーボン的一种であるケッチェンブラック（KB）の表面にCoPcの殻を形成した炭素コアシェル型触媒を用いて、高い効率でCO₂から一酸化炭素（CO）への変換を実現しました。
- 単分子層ではなく多層の CoPc が表面に形成されることが活性向上に寄与することを実験と理論の両方で証明しました。

【概要】

CO₂ は地球温暖化の原因物質であり、排出量の削減に加え、回収して有用な有機化合物や燃料に変換する資源循環技術に期待が寄せられています。

東北大学材料科学高等研究所（WPI-AIMR）の Liu Tengyi 特任助教、藪浩教授（主任研究者、同研究所水素科学 GX オープンイノベーションセンター副センター長）、Di Zhang 特任助教、Hao Li 教授（主任研究者）らの研究グループは、東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター（SRIS）の小野新平教授と吉田純也准教授、北海道大学電子科学研究所の松尾保孝教授、および東北大学発スタートアップ企業の AZUL Energy 株式会社（仙台市、伊藤晃寿社長）らのグループと共同で、AI による解析から見出した 多層 CoPc／炭素コア-シェル構造が、CO₂の電気化学的変換による CO 合成においてこれまでにない高性能を発揮することを明らかにしました（図 1）。KB との複合によって、高い触媒活性と選択性・耐久性を併せ持ち、理論計算からもこの構造が触媒活性を飛躍的に向上させるメカニズムを確認しました。

本研究で開発した CO₂ 電解技術は、安価な顔料触媒を用いて低コストかつ高効率に CO₂ から合成燃料の中間体である CO を合成できるプロセス開発に繋がり、次世代の CO₂ 有効活用（CO₂ Capture and Utilization, CCU）技術として期待されます。

本研究成果は、現地時間の 8 月 17 日に国際的な学術誌 Applied Catalysts B: Environment and Energy のオンライン速報版に掲載されました。

【詳細な説明】

研究の背景

CO₂の排出削減と有効利用は、地球温暖化対策として世界的に喫緊の課題です。その中でも、電気化学的に CO₂を多様な有機化合物の中間体になる CO などの有用化学原料へと変換する CO₂ 電解還元 (Electrochemical CO₂ Reduction, ECR) は、再生可能エネルギーを利用したカーボンリサイクルの有力な手段として注目されています。

しかし、ECR により CO₂ から CO への変換を高効率に行うためには、CO₂→CO 反応の選択性が高い触媒が必要となります。これまで金や銀などの貴金属や、銅などの遷移金属ナノ粒子が、CO₂ 変換のための電気化学触媒として用いられてきました。

これらの触媒は、主に炭素からなるガス拡散電極状にバインダーと担持された触媒電極の形で使用されます。しかし、コストが高く、選択性が不十分であるなどの課題があり、限界を打破する新しい触媒設計が求められていました。

一方、分子状触媒（特に金属フタロシアニンやポルフィリン系錯体）が高い活性を示す一方で、単分子の安定性や導電性の不足が実用化を阻んでいました。これらの既往の研究に対し、東北大学藪研究室では、金属錯体であり安価な青色顔料の一種である金属フタロシアニン系の材料を、炭素材料上に分子吸着させたり¹⁾、直接結晶化させるプロセス²⁾によって触媒電極を作製し、燃料電池や水電解・ECR など様々な電気化学反応の電極として高い選択性を実現してきました。そこでこれらの知見と情報科学の活用で様々な材料開発の効率を高めるマテリアルズインフォマティクス (MI) の知見を組み合わせ、触媒の電極における構造制御技術を駆使することにより、安価で高い選択性と耐久性を兼ね備えた ECR 触媒が実現できないかと考えました。

今回の取り組み

本研究では、共同研究者である Hao Li 教授のグループが開発した AI による大規模データ解析を用いて触媒候補を探索し、その中で有望と判断された **CoPc** を基盤分子に選定しました。さらに、**CoPc** を単分子ではなく、**CoPc 結晶**を炭素粒子表面に形成させ、**コアシェル型の構造**を構築すること（図 2）で、①反応比表面積を電極表面で増加させること、②電子伝達効率が向上し、触媒全体での電荷移動 (Surface Charge Transfer) を促進させることを実現しました。

実験の結果、-595 mA/cm²という高い電流密度、6,537 A/g という卓越した質量活性、さらに 100 時間以上にわたり 90%以上の CO 選択性（ファラデー効率、FE^{注1)}）を維持するという、実用に近い性能が実証されました（図 3）。これは、CO 変換の最大電流密度、触媒回転頻度 (Turn Over Frequency, TOF)、安定性、質量活性、変換効率 (FE) のいずれの観点においても従来の金属錯体

触媒の性能を上回る成果です（図 4）。

加えて理論計算により、この多層コアシェル構造が活性中心の電子状態を最適化し、反応経路を有利にすることが裏付けられました。

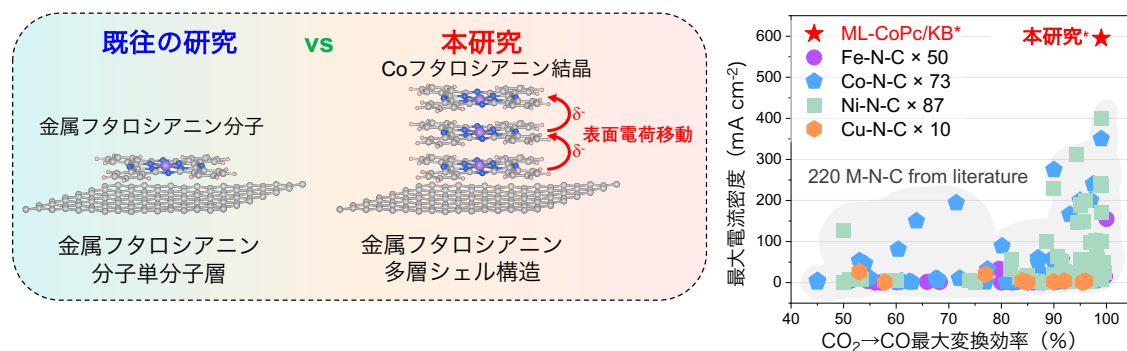


図 1. コバルトフタロシアニン（CoPc）多層シェル構造を有する触媒と既往の錯体分子触媒を用いた CO₂→CO 研究との比較。

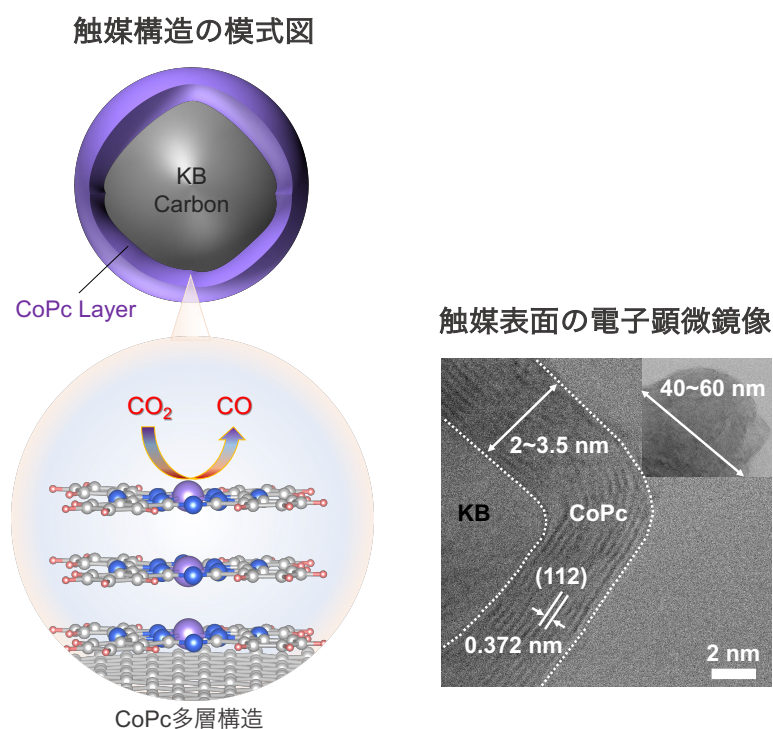


図 2. CoPc 多層構造が形成されたコアシェル型 ECR 触媒の模式図と触媒表面の電子顕微鏡像。CoPc の結晶化による多層構造が可視化されている。

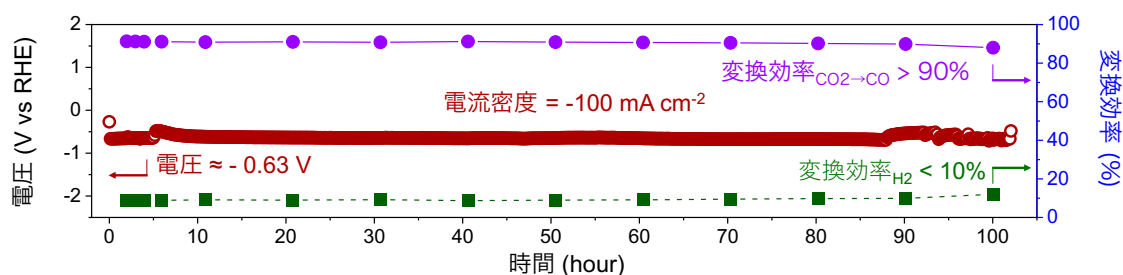


図 3. コアシェル型触媒を用いた $\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}$ 変換の効率と耐久性。

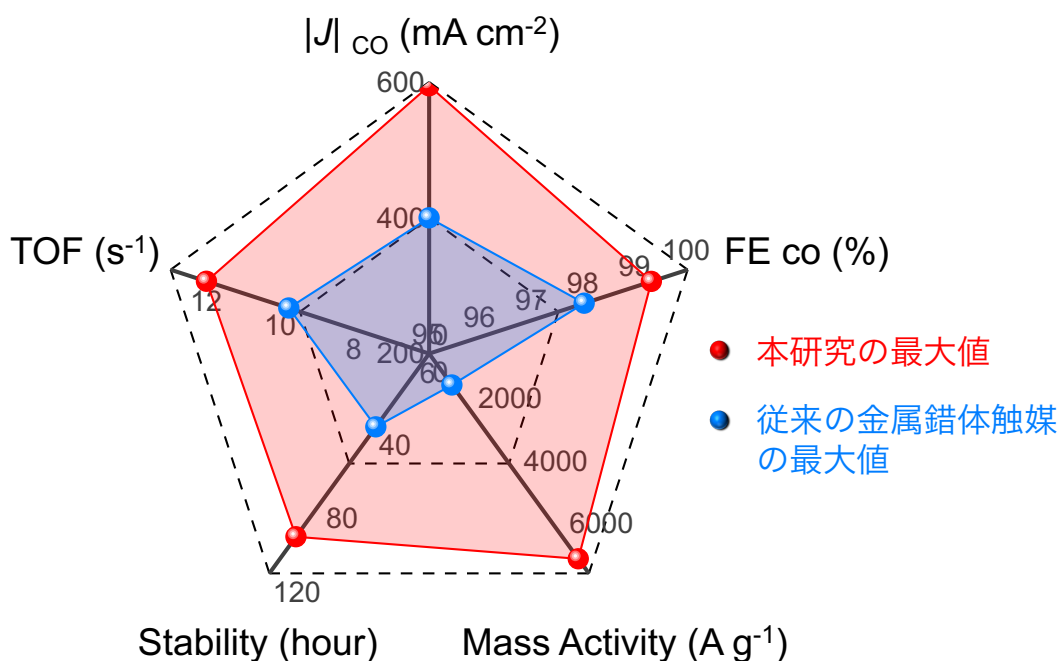


図 4. CO 変換の最大電流密度 ($|J|_{\text{CO}}$)、触媒回転頻度 (TOF)、安定性、質量活性、変換効率 (FE) の観点での従来の金属錯体触媒との比較。

本研究の意義

本研究は、従来の「単分子触媒パラダイム」を覆し、多層構造×コアシェル設計が ECR 触媒において重要であることを示しました。これは、分子触媒の安定性や電子輸送性という長年の課題を解決する新しい設計原理となり得ます。

また、AI を活用した材料探索と実験・理論解析の融合により、触媒設計の加速が可能であることも示しました。結果として、本研究は CO_2 電解還元技術の産業応用に一步近づける成果であり、持続可能なカーボンリサイクル社会の実現に大きく貢献する意義を持っています。

さらに、安価な顔料触媒を用いて CO_2 から合成燃料の中間体である CO を高効率で合成できるプロセス開発に繋がり、合成燃料のボトルネックの一つであ

る CO₂ の資源化に関わるエネルギー効率の向上とコスト削減に貢献することで、次世代の CCU に繋がる技術として期待されます。

【参考文献】

- 1) H. Yabu*, K. Nakamura, Y. Matsuo, Y. Umejima, H. Matsuyama, J. Nakamura and K. Ito “Pyrolysis-free Oxygen Reduction Reaction (ORR) Electrocatalysts Composed of Unimolecular Layer Metal Azaphthalocyanines Adsorbed onto Carbon Materials” **ACS Applied Energy Materials**, 4(12), 14380-14389 (2021).
- 2) T. Liu*, D. Zhang*, Y. Hirai, K. Ito, K. Ishibashi, N. Todoroki, Y. Matsuo, J. Yoshida, S. Ono, H. Li*, **H. Yabu***, “Surface Charge Transfer Enhanced Cobalt-Phthalocyanine Crystals for Efficient CO₂-to-CO Electroreduction with Large Current Density Exceeding 1000 mA cm⁻²” **Advanced Science**, 12(23), 2501459 (2025).

【謝辞】

本研究の一部は日本学術振興会科学研究費（JP23H00301, JP23K13703, JP24K17741, JP24K23068）、文部科学省 ARIM (No. JPMXP1223HK0074)、および科学技術振興機構未来社会創造事業（JPMJMI22I5）などの支援を受けて行われました。

【用語説明】

注1. ファラデー効率（FE）

電気化学反応において、全電流に対する生成物に寄与した部分電流の割合を示す。

【論文情報】

タイトル : Breaking the Single-Molecule Paradigm: Multilayer Cobalt Phthalocyanine/Carbon Core-Shell Structure as the Superior Active Unit for CO₂-to-CO Electroreduction

著者 : Tengyi Liu*, Di Zhang*, Y. Chu, K. Ohashi, Yutaro Hirai, Koju Ito, Kosuke Ishibashi, Yasutaka Matsuo, Jun Yoshida, Shimpei Ono, Kazuhide Kamiya, Hao Li*, Hiroshi Yabu*

*責任著者 : 東北大学 材料科学高等研究所 教授 藪 浩

東北大学 材料科学高等研究所 教授 Hao Li

東北大学 材料科学高等研究所 特任助教 Tengyi Liu

東北大学 材料科学高等研究所 特任助教 Di Zhang

掲載誌 : Applied Catalysts B: Environment and Energy

DOI : 10.1016/j.apcatb.2025.125852

URL: <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2025.125852>

【問い合わせ先】

（研究に関すること）

東北大学材料科学高等研究所 (WPI-AIMR)

教授 藪 浩（やぶ ひろし）

TEL: 022-217-5996

Email: hiroshi.yabu.d5@tohoku.ac.jp

（報道に関すること）

東北大学材料科学高等研究所 (WPI-AIMR)

広報戦略室

TEL: 022-217-6146

Email: aimr-outreach@grp.tohoku.ac.jp