

2026年 2 月 12 日

報道機関 各位

## MOF 由来の単一原子で高価な白金に匹敵する触媒を創製 凍結・二次元構造化し 100%の原子利用、次世代燃料電池に寄与

### 【本研究のポイント】

- ・単一原子触媒<sup>注1)</sup>における活性点利用<sup>注2)</sup>をほぼ 100%まで高める設計指針を確立。
- ・凍結鑄型法<sup>注3)</sup>により、二次元・単層配列ナノカーボン構造を創製。
- ・酸素還元反応<sup>注4)</sup>において、高価な白金触媒に匹敵、あるいは凌駕する性能を実証。
- ・燃料電池<sup>注5)</sup>をはじめとする次世代エネルギー変換デバイスの高効率・低コスト化に貢献。

### 【研究概要】

燃料電池などの電気化学エネルギー変換技術において、電極触媒の高活性化と資源利用効率の向上は、エネルギー変換効率の向上およびコスト低減の観点から極めて重要な課題です。特に、金属原子を単原子レベルで分散させた「単一原子触媒」は、すべての金属原子が理論的に反応に関与可能であることから、100%の原子利用を実現する究極の触媒形態として注目されています。しかしながら、従来の多孔質炭素担体を用いた単一原子触媒では、活性金属原子の多くが微細孔内部や粒子間界面に埋没し、反応物や電子が十分に到達できないため、実際の活性点利用率は理論値を大きく下回るという根本的な課題が存在していました。

名古屋大学大学院工学研究科の山内 悠輔 卓越教授らの研究チームは、金属原子が有機配位子と原子レベルで均一に配位した金属有機構造体(MOF)<sup>注6)</sup>を、単一原子触媒の理想的な前駆体として活用しました。本研究では、界面活性剤支援の凍結鑄型法を用いることで、MOF ナノ粒子を成長する氷結晶界面に沿って単層二次元的に配列させることに成功しました。さらに、この配列構造を保持したまま熱処理を行うことで、MOF 由来の金属原子を凝集させることなく、面内に均一に固定したメソ孔<sup>注7)</sup>に富む二次元ナノカーボン構造へと変換する新しい材料創製手法を確立しました。

このような二次元・階層多孔構造<sup>注8)</sup>により、触媒層全体における電子輸送および反応物・生成物の物質輸送が著しく改善され、従来は反応に寄与できなかった触媒内部の単一原子活性点まで効率的に活用できるようになりました。その結果、酸性条件下における酸素還元反応において、MOF 由来単一金属原子の活性点利用率は約 99%に達し、従来型単一原子触媒のみならず市販白金触媒をも上回る電気化学性能を示しました。本成果は、単一原子触媒の性能を理論限界に近づけるための新たな構造設計指針を提示するものであり、次世代燃料電池をはじめとする高効率エネルギー変換デバイスへの応用が期待されます。

## 【研究背景と内容】

単一原子触媒は、金属原子を原子レベルで分散させることで、触媒活性点の最大化と金属資源使用量の大幅な削減を同時に実現できる理想的な触媒として注目されています。特に燃料電池をはじめとする電気化学エネルギー変換反応においては、触媒活性と耐久性を両立しながら貴金属使用量を低減することが強く求められています。しかし、従来の多孔質カーボン担体を用いた単一原子触媒では、微細孔が過密に形成されることや、触媒粒子が三次元的に無秩序に堆積することにより、反応物や電子が活性点へ到達しにくく、多くの単一金属原子が反応に寄与しないまま内部に埋没してしまうという根本的な課題がありました。このため、理論的には100%に達し得る活性点利用率が、実際には大きく制限されていました。

本研究では、こうした課題を根本から解決するため、金属有機構造体(MOF)を前駆体として用い、界面活性剤を用いた凍結鑄型法を用いて、新しい構造制御戦略を提案しました。凍結過程において成長する氷結晶界面に沿って MOF 前駆体粒子を配列させることで、粒子が単層状に整列した二次元構造を形成し、マクロスケールで高い秩序性を有する前駆体配置を実現しました。さらに、この二次元配列構造を維持したまま熱処理を行うことで、炭素骨格中に単一原子として安定に固定することに成功しました。加えて、熱処理過程において生じる粒子収縮と構造拘束に起因する「二重応力効果」により、粒子内部にメソ孔が自発的に形成されました。この結果、マクロスケールでは二次元配列による直線的な電子・物質輸送経路が確保され、ミクロスケールではメソ孔ネットワークを介した反応場への高いアクセス性が実現されました。こうした階層的な構造制御により、従来は反応中に埋没していた単一原子活性点がほぼ完全に露出し、反応に有効に関与できる環境が整えられました。

その結果、酸素還元反応において理論限界に近い極めて高い活性点利用率が達成され、単一原子触媒の性能を本質的に引き出すことに成功しました。本手法は鉄系の単一原子触媒にとどまらず、コバルト、ニッケル、マンガンといった非貴金属系触媒に加え、白金などの貴金属系単一原子触媒にも適用可能であり、幅広い電気化学反応に対応できる汎用的な材料設計戦略としての展開が期待されます。

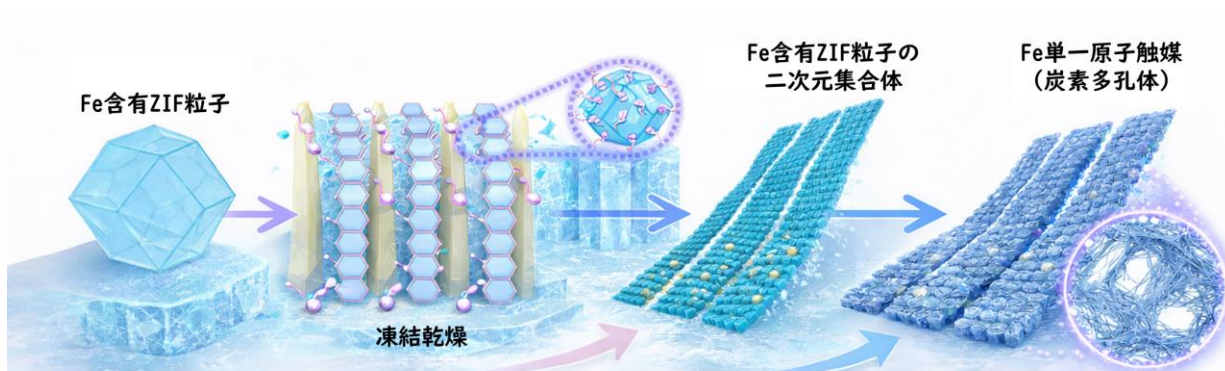


図. MOF 粒子(Fe 含有 ZIF 粒子)を前駆体とし、凍結乾燥法を用いて二次元構造を形成した後、熱処理によって Fe 単一原子触媒へと変換する合成プロセス。

## 【成果の意義】

本研究は、単一原子触媒の高性能化において長年にわたり未解決であった「活性点利用率」という根本的な課題に対し、材料の構造設計そのものによって実質的な解決策を提示した点に大きな意義があります。これまで単一原子触媒は、理論的にはすべての金属原子が活性点として機能し得る一方で、実際の反応系では多くの原子が反応に寄与できないという乖離が存在していました。

本成果により、単一原子触媒の性能は金属種や担体材料の改良に依存する段階から、活性点をいかに「使い切るか」を設計する段階へと進展しました。これは、触媒材料の高性能化にとどまらず、白金などの希少金属や戦略金属の使用量を最小限に抑えながら高効率な反応を実現する道を拓くものであり、資源制約が厳しさを増す社会において極めて重要な意味を持ちます。さらに、燃料電池をはじめとする電気化学エネルギー変換デバイスの高効率化・低コスト化を通じて、脱炭素社会の実現や持続可能なエネルギーシステムの構築に貢献する基盤技術としての展開が期待されます。

## 【研究者からコメント】

山内 悠輔 教授(名古屋大学・責任著者):

単一原子触媒は、長年にわたり「理論的には理想的だが、実際には十分に活かしきれていない」材料でした。本研究では、活性点の数を増やすことよりも、存在する活性点をどれだけ反応に参加させられるかという視点に立ち返り、構造設計によってその問題に正面から取り組みました。MOF を前駆体として二次元構造へ、空間制御を経て炭素材料へと変換することで、原子レベルの機能を材料全体として最大限に引き出せることを実証できたと考えています。

## 【用語説明】

### 注1) 単一原子触媒(Single-Atom Catalyst):

金属原子をナノ粒子ではなく、原子一つ一つの状態で担体上に分散させた触媒。理論的にはすべての金属原子が活性点として機能し得るため、極めて高い原子利用率が期待されている。

### 注2) 活性点利用率(Site Utilization):

触媒中に存在する活性点のうち、実際の反応に寄与している割合を示す指標。単一原子触媒では重要な性能指標であり、理論限界は100%とされる。

### 注3) 凍結鑄型法(Freeze-Casting Method):

溶液を凍結させる際に成長する氷結晶を鑄型として利用し、材料を特定の方向や形状に配列させる構造制御手法。本研究では、二次元単層配列構造の形成に用いられた。

### 注4) 酸素還元反応(ORR:Oxygen Reduction Reaction):

燃料電池のカソード(空気極)で進行する反応で、酸素分子が電子と反応して水を生成する過程。反応速度が遅く、高性能触媒が必要とされる。

### 注5) 燃料電池:

燃料と酸素の電気化学反応により、化学エネルギーを直接電気エネルギーへ変換

する発電デバイス。高効率・低環境負荷な次世代エネルギー技術として注目されている。

**注6) 金属有機構造体(MOF: Metal-Organic Framework):**

金属イオンと有機配位子が規則的に結合した多孔性結晶材料。2025年ノーベル化学賞でも注目を浴びた材料である。

**注7) メソ孔(Mesopore):**

直径 2～50 nm の細孔。微細孔に比べて反応物や生成物の拡散が容易であり、触媒反応における物質輸送の向上に寄与する。

**注8) 階層多孔構造:**

ミクロスケール(微細孔・メソ孔)とマクロスケール(構造配列)を組み合わせた多段階の多孔構造。電子輸送と物質輸送を同時に最適化できる。

**【論文情報】**

雑誌名: Nature Communications

論文タイトル: Near-100% site utilization of single atoms for efficient electrocatalysis

DOI: 10.1038/s41467-025-67756-8

URL: <https://www.nature.com/articles/s41467-025-67756-8>



東海国立大学機構は、岐阜大学と名古屋大学を運営する国立大学法人です。

国際的な競争力向上と地域創生への貢献を両輪とした発展を目指します。

東海国立大学機構 HP <https://www.thers.ac.jp/>

