



配信先：大阪科学・大学記者クラブ、文部科学記者会、科学記者会

大阪公立大学

## 自動車や航空機の軽量化・高強度化に貢献！ 金属とプラスチックが接合するメカニズムを原子レベルで解明

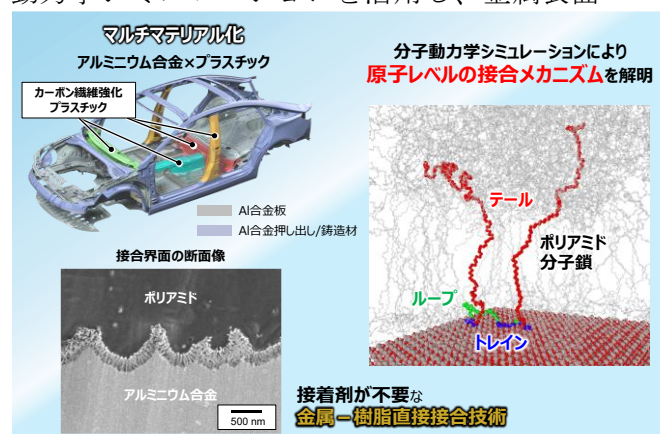
### <ポイント>

- ◇アルミニウム合金とプラスチックの接合界面において、分子動力学シミュレーション※1を活用し、金属表面の化学的構造とプラスチックの分子構造が接合強度に及ぼす影響を解明。
- ◇分子鎖※2の局所的な形状を定量化する新しい指標を開発。これにより、金属とプラスチックの接合部が変形した時に分子鎖のどの部分がどの程度変化するかという分子形状変化が明らかに。
- ◇接合強度を高めるための、最適な金属表面の化学的構造とプラスチックの分子構造の設計指針を示すことが可能に。

### <概要>

近年、自動車や鉄道などの輸送用機器の軽量化のために、従来は金属で作られていた部品の一部をプラスチックなどに置き換えるマルチマテリアル構造※3の導入が進められており、接着剤を使用せずに金属とプラスチックを直接接合する技術が注目を集めています。しかし、その接合界面における原子レベルでの変化の観察は難しく、十分に解明されていません。

大阪公立大学大学院工学研究科機械系専攻の吉田 十義客員研究員、寺元 航希大学院生（博士前期課程2年）、桑原 卓哉講師の研究グループは、アルミニウム合金とポリアミド※4の化学的な相互作用による接合界面において、分子動力学シミュレーションを活用し、金属表面の化学的構造とプラスチックの分子構造が接合強度に及ぼす影響を解明しました。さらに、分子鎖の局所的な形状を定量化する新しい指標を開発。これにより、金属とプラスチックの接合部が変形した時に分子鎖のどの部分がどの程度変化するかという分子形状変化が明らかになりました。これらの結果は、接合強度を高めるための、最適な金属表面の化学的構造とプラスチックの分子構造の設計指針を示すことを可能にします。



本研究成果は、2025年11月10日に国際学術誌「Communications Materials」にオンライン掲載される予定です。

材料の界面は“埋もれている”ため直接観察ができません。分子シミュレーションは、こうした界面の視覚化を可能にする強力なツールです。今後も、実験データの裏付けに留まらず、シミュレーションから新しい現象や物質の発見を生み出していきます。



桑原講師

吉田客員研究員

寺元大学院生

## <研究の背景>

自動車・鉄道などの輸送用機器の軽量化は、温室効果ガスの排出量やエネルギー消費量を削減し、環境への負荷の低減やカーボンニュートラル社会の実現につながる重要な課題です。近年、車体の軽量化を実現するために、従来は金属で作られていた車体の一部を炭素繊維強化樹脂<sup>※5</sup>に置き換えるマルチマテリアル構造の導入が進められています。その中で、接着剤を用いずに金属と合成樹脂（プラスチック）を直接接合する金属樹脂直接接合<sup>※6</sup>が注目を集めています。この技術は、熔融した樹脂を金属表面に高压で流し込み、表面の凹凸を利用した機械的なアンカー効果<sup>※7</sup>と、界面での化学的な相互作用により接合を実現するものです。しかし、金属と樹脂の界面で起こる原子・分子レベルの化学的相互作用や吸着形態は、実験での観察が難しく、多くが未解明のままとなっています。そのため、接合できる金属と樹脂の種類が限定されたり、使用中に接合強度が低下するなどの課題がありました。

## <研究の内容>

本研究では、分子動力学シミュレーションを活用し、金属と樹脂の接合界面における原子レベルの接合メカニズムを解明することにより、高い信頼性と高耐久性を兼ね備えた金属樹脂接合界面を設計するための原理の確立を目指しました。

ポリアミド（PA）は一般的にナイロンと呼ばれる高分子で、低吸水性かつ強度や剛性が高いため、工業的に広く利用されています。一方、アルミニウム合金は鉄に比べて軽量で、機械的強度や剛性に優れているため、輸送機器の車体などに用いられてきました。本研究では、このPAとアルミニウム合金の接合界面に着目し、全原子分子動力学法を用いて引張シミュレーションを実施しました。界面の化学構造が接合にどのような影響を及ぼすかを明らかにするために、PAには直鎖状のPA6と芳香環を有するPAMXD6（図1a）を用い、アルミニウム合金表面のモデルである酸化アルミニウム（ $\text{Al}_2\text{O}_3$ ）にOH終端がある場合とない場合を比較しました。

引張初期では、ひずみの増加とともに応力が線形に増加しますが、その後急激に減少し始めます。この変形初期の弾性変形領域では、ひずみはPA内部に様に蓄積されており、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 表面のOH終端基のあり/なしではなく、PAの化学構造が重要となります。一方、応力が急激に減少する変形後期（ひずみ軟化領域）では、ひずみがPA/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ の接合界面に集中しており、表面終端のあり/なしが支配的であることが分かりました。特に、芳香環を有するPAMXD6とOH終端を施した $\text{Al}_2\text{O}_3$ の組み合わせの場合に、顕著な応力の減少が見られました。

そこで、このときの界面近傍に存在する高分子鎖の吸着形態および形状変化を調べるために、まず分子

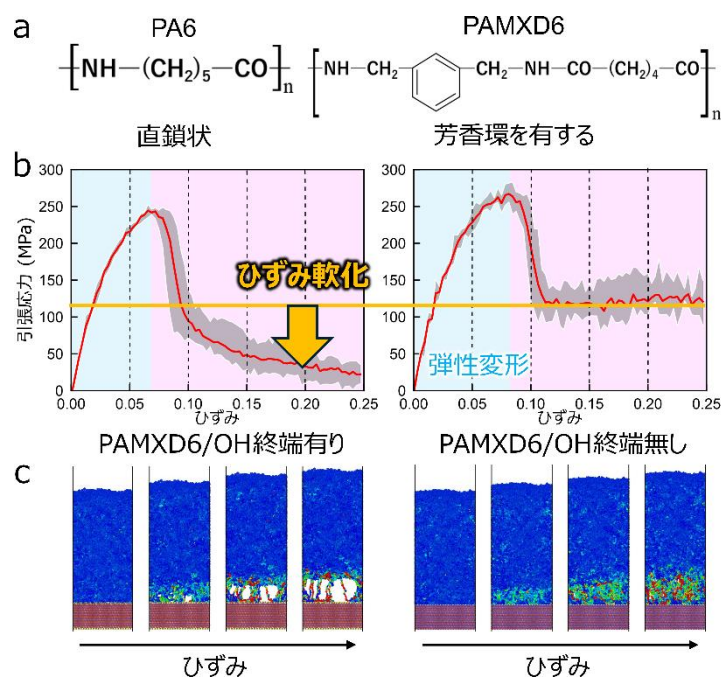


図1 ポリアミドの化学構造および引張シミュレーション結果の一例  
b) 応力-ひずみ曲線 c) 界面の原子構造

鎖の区間（セグメント）ごとの形態を次のように行いました。表面吸着したセグメントを「トレイン」、二つのトレイン間に存在する非吸着セグメントを「ループ」、PA 内部と繋がる非吸着の両末端セグメントを「テール」と分類しました（図 2a）。そして、引張過程における各セグメントの変化が、高分子構造と表面構造の組み合わせに大きく左右されることを明らかにしました。特に、顕著なひずみ軟化を示す PAMXD6 と OH 終端  $\text{Al}_2\text{O}_3$  の接合界面では、表面吸着高分子鎖全体の脱着とループがテールへと転移する現象が支配的であることが分かりました。一方、PA6 と PAMXD6 の両方において、終端なし  $\text{Al}_2\text{O}_3$  表面では、テールのみが伸長していく様子が観察されました。

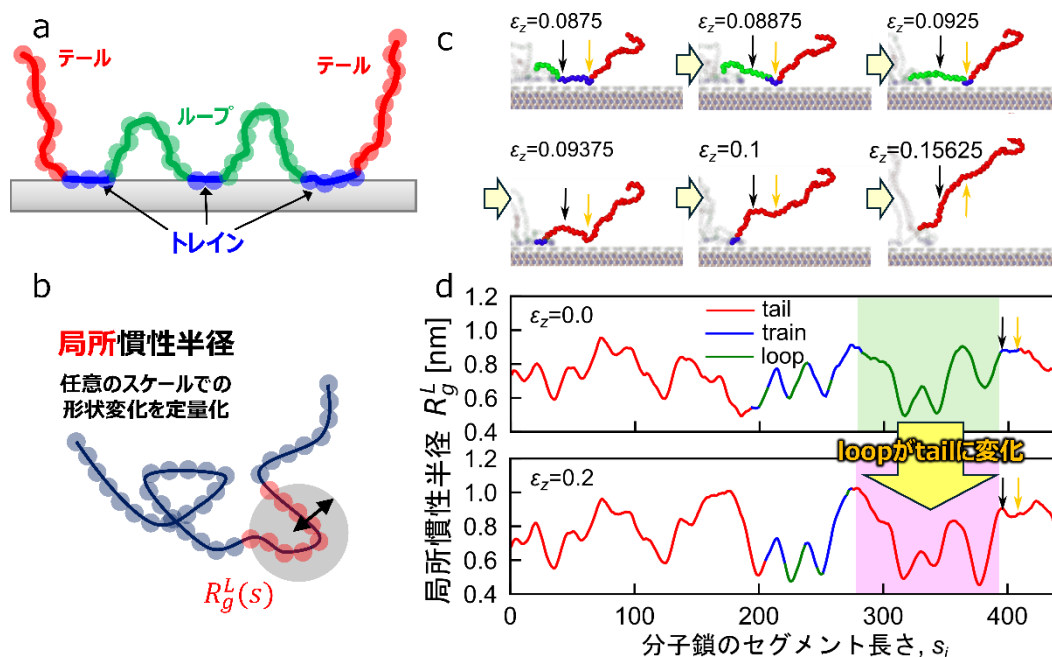


図 2 表面吸着した高分子鎖の形態と形状（コンフォメーション）変化

次に、引張に対する局所的な高分子鎖の形状（コンフォメーション）変化を評価するために、新たに「局所慣性半径  $R_g^L$ 」を導入しました（図 2b）。従来の慣性半径  $R_g$  は、分子鎖全体の空間的広がりを表すものでしたが、本研究グループは局所的な分子鎖の形状を記述する量へと一般化することで、引張変形時に分子鎖のどの部分がどの程度変化するかを定量化できるようになりました。そして、PAMXD6 と OH 終端された  $\text{Al}_2\text{O}_3$  に吸着している 1 本の高分子鎖に注目し、引張に伴うセグメントの形態変化と局所慣性半径の変化の解析を行いました。その結果、変形とともに、トレインが徐々に短くなりループへ変化し、やがてテールに変化する様子（図 2c）、また、このトレイン→ループ→テールへと形態変化が起こる箇所において局所慣性半径が大きく変化していることが分かりました（図 2d）。これは、トレインのループ転移あるいはテール転移に伴う局所的な構造の緩和が進むことを示すと同時に、局所慣性半径がコンフォメーション変化と接合界面の力学応答の関係を理解する上で極めて有効であることを示唆しています。

以上の分子動力学シミュレーション解析から、表面吸着分子鎖の引張に対する応答モードは、(1) テール伸長、(2) ループ→テール転移、(3) 分子鎖脱着の三つに分類でき、これらの割合が接着強度と強く相関することを明らかにしました。つまり、ループ→テール転移や分子鎖脱着を抑制し、表面吸着セグメントであるトレインの長さを最大化あるいは維持する金属樹脂界面を設計することが、高信頼・高耐久性をもつ接合界面を創出する鍵であると考えます。

### <期待される効果・今後の展開>

本研究により、原子・分子レベルでの高分子鎖の挙動や接合メカニズムが明らかになり、接合強度を高めるための設計原理が得られました。これにより、金属側の表面処理手法や樹脂の種類を選定する際の明確な指針が示され、これまでの実験結果に頼った材料選定から、メカニズムや原理の理解に基づいた理論設計が進むと期待されます。また、本研究で新たに導入した物理量である「局所慣性半径」は、今後さまざまな高分子材料に応用することで、原子・分子レベルで局所的な挙動を理解し、新たな高分子設計や接合技術の開発に役立つことが期待されます。

### <資金情報>

本研究は、JSPS 卓越研究員事業 (JPMXS0320210079)、JST 戦略的創造研究推進事業さがけ (JPMJPR22A6)、JSPS 科研費 (25K01146) の支援により実施されました。

### <用語解説>

- ※1 分子動力学シミュレーション: コンピューターを用いて古典力学のニュートン運動方程式を解くことで分子や原子の動きを再現する手法。
- ※2 分子鎖: 多数の小さな分子の繰返し単位が長く鎖のように連結した巨大な分子の構造。
- ※3 マルチマテリアル構造: 部材ごとに異なる材料 (例: 金属と樹脂) を組み合わせて用いる構造。軽量化と高強度を両立できる。
- ※4 ポリアミド: 一般的には「ナイロン」として知られ、高い強度、耐久性、耐摩耗性、耐熱性を持つ合成樹脂。
- ※5 炭素繊維強化樹脂: 炭素繊維を樹脂に混ぜて強化した複合材料。金属より軽く、強度や剛性に優れるため、航空機や自動車の部材に広く使われている。
- ※6 金属樹脂直接接合: 接着剤やボルト・リベットを使わずに、金属と樹脂を直接接合して一体化させる技術。実際の接合には射出成形や溶融圧着を用いる。
- ※7 アンカー効果: 塗料や接着剤が素材表面の微細な凹凸に入り込んで硬化し、物理的ないかりのように引っ掛かることで、接着力や密着力が高まる現象。

### <掲載誌情報>

【発表雑誌】 Communications Materials

【論文名】 Chemical Functionalities Govern Polyamide–Alumina Adhesion through Local Conformational Dynamics

【著者】 Toyoshi Yoshida, Koki Teramoto, Takuya Kuwahara

【掲載 URL】 <https://doi.org/10.1038/s43246-025-00977-y>  
<https://www.nature.com/articles/s43246-025-00977-y>

#### 【研究内容に関する問い合わせ先】

大阪公立大学大学院工学研究科  
講師 桑原 卓哉 (くわはら たくや)  
TEL : 072-247-6180  
E-mail : [kuwa@omu.ac.jp](mailto:kuwa@omu.ac.jp)

#### 【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学 広報課  
担当 : 谷  
TEL : 06-6967-1834  
E-mail : [koho-list@ml.omu.ac.jp](mailto:koho-list@ml.omu.ac.jp)