

脱線できるのがサイエンスの醍醐味

佐々木遼馬（東京科学大学）

文／堀部 直人 2025年取材

理学部に進むも理論の研究室がないことが発覚。指導教員の早期退職。博士号取得後は企業へ。脱線につぐ脱線の末、東京科学大学総合研究院化学生命科学研究所で助教を務める佐々木遼馬さんは、計算材料科学者として、電池材料のイオン伝導度計算を従来の100倍高速化する手法を開発し、次世代電池開発の加速に貢献します。佐々木さんは、自身のキャリアを振り返り、計画通りにいかない経験こそが自分にしかできない研究を生み出したと語ります。

間違えて進学してしまった先で電子相関を学ぶ

高校生のときのSSH（スーパーサイエンスハイスクール）が、佐々木さんが研究者を志すきっかけでした。イギリスに渡航したり、大学の研究者と交流したりする中で、研究という営みに魅了されていきました。「『博士』という響き、かっこよくないですか」と無邪気に憧れていた頃のことを笑いながら話します。

化学に強い興味を持っていた佐々木さんは、東京工業大学工学部の応用化学に進みます。ところが、1年次に物理学にすっかりハマってしまいます。そして、「物理と化学を絡めた理論ベースの研究がしたい。理論をやるなら理学部ではないか」と考え、理学部化学へと所属を変えました。

ここで思わぬ「脱線」が発生します。佐々木さんが進学した理学部化学科には、理論の研究室がなかったのです。「理論の研究室がないのに気づかずに間違えて進学してしまったんです」と苦笑い。そこで取り組むことになったのは、二電子励起分子の電子相関という量子化学の実験研究でした。つくばのKEK-PF（高エネルギー加速器研究機構フォトンファクトリー）で昼夜問わず実験に従事し、単純化された一粒子的な近似描像では見られない美しい現象を多く目の当たりにしました。その現象の根源は、電子同士が複雑に絡み合う多粒子的な効果（電子相関）にあり、「一粒子近似に頼らず多粒子をしっかりと扱う」ことの重要性を身をもって学んだのです。この経験が幾年かの時を経て、佐々木さんの研究で花開きます。しかし、それはまだ少し先の話です。

予想外の転機が、新しい世界を開く

修士課程に進んだ佐々木さんは、念願の理論研究に取り組みます。液晶という、固体と液体の中間的な性質を持つ物質の中で、どのように熱が流れるかを理論ベースで解析する「液晶材料の熱伝導機構」というテーマの研究でした。

ここで佐々木さんは「非平衡シミュレーション」という手法を学びます。通常のシミュレーションは平衡状態という「すべての物質やエネルギーが全体として落ち着いている状態」を想定するのですが、非平衡シミュレーションでは温度の勾配や電位の偏りといった、実際のデバイスや材料が動作する条件を課します。

順調に研究を進め、博士課程に進もうとしたとき予想外の事態が起こります。指導教員が想定より早く退職することになってしまったのです。そこで手を差し伸べてくれたのが、当時東京工業大学にいた一杉太郎先生でした。一杉先生の紹介で、佐々木さんは館山佳尚先生の研究室に加わることになります。館山先生は茨城県つくば市の物質・材料研究機構（NIMS）で研究を行っていました。佐々木さんはそこで、電池材料のイオン伝導という新しい研究テーマに出会うことになります。

液晶から電池材料へ。一見、大きな脱線に思えますが、佐々木さんにとっては自然な流れだったようです。「どちらも輸送現象を扱っているという点で共通していますし、修士で学んだ非平衡シミュレーションの手法が活きるテーマでした。」

企業での1年間——課題解決の現場で見たもの

2023年3月、博士号を取得した佐々木さんは、多くの人が予想しなかった選択をします。アカデミアに残るのではなく、住友化学株式会社のデジタル革新部・R&Dデータ科学チームに研究員として入社したのです。「アカデミアの世界を経験して、自分なりの仕事というものが少しわかってきました。今度は企業の視点を学んでみたい。」そう考えての決断でした。あえて脱線してみることにしたとも言えるかもしれません。

住友化学では、社内のDX推進という、研究とは異なる役割を担当しました。シミュレーションを専門とし、情報技術と材料の両方がわかる人材として、佐々木さんは企業の研究活動にDXを取り入れて新しい競争力を生み出すサポートをすることになったのです。「全社に関わる仕事だったので、日本の企業がどうやってお金を稼いでいるか、どう研究を進めているか、俯瞰的に見られたのがよかったです。また、マテリアルズインフォマティクスの最新技術に触れることもできました。」

一方で、企業での1年間を通じて、佐々木さんはある重要な気づきを得ます。「企業の研究を見せてもらって、脱線ができないなっていうのを感じました」と佐々木さん。この意味を、エンジニアリングとサイエンスの違いとして説明してくれました。

「エンジニアリングというのは、与えられた特定の課題を解決していく活動です。アカデミアでは、ある課題にトライしていくうえで別の課題が生じたり、私のように思わぬきっかけで別のテーマに挑戦することになったりということがあります。このとき、そっちの方がおもしろいと思ったら、そっちに全集中してもいい。この脱線できる自由がアカデミアの研究の楽しいところだと思います」

脱線できる自由を求めてアカデミアに

2024年4月、佐々木さんは東京科学大学（旧東京工業大学）の助教として、アカデミアに戻る決断をします。企業に入社してわずか1年後のことでした。

きっかけは、博士課程の指導教員だった館山先生が、物質・材料研究機構から東京科学大学に移るタイミングで助教を募集していたこと。「本当はもっと長く企業にいるつもりでした。でも、大学の公募ってタイミングが読めないんです。こういう機会はめったにない。戻るのは今しかないと思いました」

「学生時代に3回研究室を変更して、さらに企業も経験した。こうした経験が独自の研究につながっています」と佐々木さんは語ります。物理・化学・情報の学際領域で、異分野の着眼点を持ち、企業とアカデミアの違いも知っている。この独自の視点こそが、佐々木さんの強みです。

すべての経験が結実する——イオン渋滞学

アカデミアに復帰した佐々木さんが取り組んでいるのが、「イオン渋滞学」という新しい学問領域の構築です。この学術変革領域研究(A)は、電池や触媒の中でのイオンの流れを、道路における自動車の交通渋滞になぞらえて理解しようという独創的なプロジェクトです。

次世代電池、特に全固体電池の開発を加速するためには、新しい電解質材料のイオン伝導度を迅速に評価する必要があります。しかし、従来の計算手法には大きな問題点がありました。よく用いられる各イオンが独立して動くと仮定する近似では、多数のイオンが協同的に動く「イオン渋滞」の効果を捉えられないのです。この問題点にいち早く気づいたきっかけは、学部時代に二電子励起状態の研

究で学んだ「一粒子近似に頼らず多粒子をしっかりと取り扱う」必要性を説いた学問構造からです。二電子励起状態と全固体電池、どうやっても交わらないと思っていた分野の根本には共通した学問構造があったのです。しかし、多粒子の相関をしっかりと取り扱うのには膨大な計算コストがかかってしまうことが課題でした。

この計算の壁を打ち破るために佐々木さんらが開発したのが、「定電流非平衡分子動力学法」です。これは、実験室でバッテリーの性能を評価するために行われる「定電流試験」を、コンピュータの中で仮想的に行うことに相当します。

その成果は劇的でした。従来法と比較して、デバイスの動作温度である室温付近で100倍を超える計算の高速化を達成したのです。この研究成果は、学術誌『PRX Energy』に掲載され、東京科学大学と科学技術振興機構から共同でプレスリリースされるなど、高い注目を集めました。

この画期的な手法の開発は、佐々木さんのこれまでの「脱線」の積み重ねから生まれました。学部で学んだ電子相関の概念がイオン相関の理解に活き、修士で学んだ非平衡シミュレーションの手法が土台となり新しい計算手法に組み込まれていきました。

「この研究は自分にしかできないだろうという実感があります」と力強く語る佐々木さん。それは、一見バラバラに見える経験を統合し、独自の視点から問題に取り組んでいることからくる自信なのでしょう。計画性のなさから出会った研究テーマ、予想外の転機、意図的な脱線と脱線できる自由への憧れ。それらすべてが、今この瞬間のブレイクスルーを生み出したのです。

振り返るとすべて繋がっている

佐々木さんに博士課程への進学を迷っている学生へのメッセージを尋ねると、ロマンと現実の両面からその魅力を語ってくれました。

「博士課程の間って、本当に研究だけに没頭できる、約束された期間なんです」と佐々木さん。「与えられたテーマではなく、テーマをデザインするところまでできる楽しさがあります。」そして、佐々木さん自身の経験を踏まえて、こう付け加えます。「自分の弱点や失敗も、研究という営みの中では独自性に変わります。計画性がなくて脱線ばかりでも、それが結果的に自分にしかできない研究を生むんです。自分らしい生き方そのものが研究の武器になる。それが博士課程のおもしろさであり、ロマンだと思います」

一方、現実的な視点からも、博士課程の価値を強調します。「周囲の博士進学者に比べて研究への熱量が足りないんじゃないかと思う人ほど博士課程に進むべきだと思っています。自分のやりたいことでより大きな力を発揮する熱量が高い人だけでは社会は成り立ちません。高い専門性を持ちつつも臨機応変に色々な課題に対応できる柔軟な人も必要です。博士課程では、人類が誰も解けていない課題を見つけ解いていくことで、課題発見から解決までのスキルセットを十二分に身につけられます。今はVUCAの時代と言われ、先行きが見えない中で臨機応変に対応できる人材がますます求められています。10年後に希少かつ社会に求められる人材になるのに、博士課程はうってつけなのです」

佐々木さんは力強くこう締めくくります。「脱線を恐れずに、自分がおもしろいと思う方向に進んでいってほしい。計画通りにいかないことも、後から振り返ればすべて繋がっているはずです」

佐々木 遼馬 (SASAKI Ryoma)

東京科学大学 総合研究院 化学生命科学研究所 助教

2018年東京工業大学理学部化学科卒業。2020年同大学院物質理工学院応用化学系修士課程修了。2023年同博士課程修了。博士（工学）。博士課程在学中、日本学術振興会特別研究員(DC2)および物質・材料研究機構(NIMS)ジュニア研究員を兼任。2023年住友化学株式会社デジタル革新部・R&Dデータ科学チーム研究員。2024年より現職。

研究室HP:

<https://www.cd-mach.cls.iir.titech.ac.jp/>

https://srak-uf.github.io/about_jp/