

[8] ケンブリッジ大学化学科を訪問して

名古屋大学 大学院理学研究科

岡本祐幸 okamoto@phys.nagoya-u.ac.jp

私は名古屋大学のサバティカル制度を利用して、2011年4月初めから2012年3月末までの1年間、ヨーロッパの3つの研究機関に滞在した。すなわち、4月からの3ヶ月間は、伊国フィレンツェの郊外のセストフィオレンティーノにある国立研究所 Institute for Chemistry of Organo Metallic Compounds に、7月からの6ヶ月間は、英国ロンドンの北 100 キロ弱の距離にある University of Cambridge に、そして、最後の3ヶ月間は、仏国パリ市内の国立研究所 Institute of Physical Chemical Biology に滞在した。今回、特にケンブリッジ大学の様子を書くように依頼されたので、以下では、私のケンブリッジ大学での半年間について思い出すままに書くことにする。写真は全て筆者のデジタルカメラで撮影したものである。

ケンブリッジ大学化学科の建物はケンブリッジの町で、30 幾つあるカレッジの分布地域の南の端の Lensfield Road に面している。写真1はこの通りからの入り口を示す。



写真1 : Lensfield 通りに面した化学科の門。正面から右側に大きな駐車場がある。左奥に見える建物が化学科の建物。

訪問の数か月前に、理論化学グループの David Wales 氏に国際会議で会ったので、「来年行きますので宜しくお願いします。」と言ったら、「到着したら、まず、化学科で最も大切な場所、つまり、ティールームへ案内します。」と言った。写真2がそのティールームである。学科が大きな食堂を持っているようなものであるが、主に紅茶やコーヒ

ーを飲むのが目的で、食べ物としては、お菓子の様なもの以外では、サンドイッチを売っている程度なので、外から「お弁当」などを持ち込む人も多い（私も時々、近く中華レストランからチャーハンを買ってきて食べたりした）。確か、午前9時から午後4時ぐらいまで飲食物を販売していたが、それ以外の時間帯でも入室できて、自動販売機から飲み物や菓子を買えるようになっていた。昼食時が一番混むが、それ以外には、午前10時頃と午後3時頃にお茶をする人もいる。学科として決まったお茶の時間というのはなかったが、Wales 研では毎日午前か午後（または両方）に研究室のメンバーが Wales 氏を囲んで一緒にお茶やコーヒーを飲みながら、研究の話や雑談をしていた。



写真2 : 化学科のティールーム Cyber Cafe.

私の正規の訪問先は、ケンブリッジ大学化学科の Christopher Dobson 教授の研究室であった。Dobson 教授は蛋白質の折り畳みの実験的研究の世界的権威の一人である。私は蛋白質の折り畳みの計算機シミュレーションをやってきたし、Dobson 教授が最近特に力を入れている、蛋白質の誤った折り畳みに起因するアミロイド病に関する実験的研究について学びたいというのが目的であった。Dobson 教授は St John's College の学長（このカレッジでは、Master という称号を使う）も務めていて、とても多忙であったが、武田薬品の小久保裕功君等との共同研究である、レプリカ交換傘サンプル法による薬剤候補の蛋白質へのドッキングシミュレーションの結果には大いに興味を持って頂き、ぜひ共同研究を進めよう

と提案された。また、Dobson 研のゼミに出るとともに、米国 Maryland 大学の大学院生の時に 2 カ月間私の名大の研究室に滞在したことがある Edward O'Brien 博士研究員等の若い人と議論した。夏休み中は、イタリア人、スペイン人など次から次へと 1 週間ぐらいの期間他の大学の大学院生が Dobson 研を訪問したので、いろいろな国の学生と同室になった。Dobson 研の博士研究員や大学院生が指導する訳である。一度などは、高校生（日本で言えば高校 3 年生）が 1 カ月ぐらい夏休みに滞在して、大学院生が実験指導などをしていたのには驚いた。写真 3 は St John's College の Hall と呼ばれる（正餐のための）大食堂の隣りの Green Room という部屋（食前酒を飲んだり、食後にコーヒーを飲んだりする部屋）で撮ったものである。このようなガウンを着られるのは、ケンブリッジの修士号以上の学位を持っている人（とケンブリッジの学生）に限られ、たとえ、オックスフォードの学位を持っていても、ガウン着用は許されない。勿論、正規の教員になった人はケンブリッジの修士号と同等以上であるという承認を大学から得てからやっとガウン着用が許されるらしい。



写真 3：正餐のためにアカデミックガウンを着たホストの Dobson 教授（右端）と St John's College のフェロー達。右から 2 人目：Max Kramer 氏（宗教学）、右から 3 人目：Stefan Reif 教授（中世へブライ学）、左端：YOGI こと Roger Griffin 教授（天文学）。

Dobson 研以外の人では、主に、化学計算化学グループの人達と交流した。計算化学グループ（Center for Computational Chemistry）の主幹は分子シミュレーションの大家 Daan Frenkel 教授である。ちなみに、ケンブリッジでは（他のイギリスの大学もそうかも知れないが）、日本の大学の正教

授に対応する職名は Reader であり、准教授以下が Lecturer のようだ。Professor というのは、アメリカの大学の Chaired Professor に対応し、特別な基金により用意された教授職ということになる。有名なのは、ニュートンやディラックやホーキング等が務めた Lucasian Professor of Mathematics であるが、Frenkel の場合、1968 Professor of Theoretical Chemistry というのが正式名のようなのである（彼のホームページによる）。また、Dobson 教授の方は、John Humphrey Plummer Professor of Chemical and Structural Biology である（ちなみに、後で出てくる Lennard-Jones は John Humphrey Plummer Professor of Theoretical Chemistry であった）。

Frenkel 教授以外では、元々オックスフォード大学時代の Dobson 教授の研究室の研究員として Dobson 教授と長く（そして現在も）共同研究を続け、最近、「独立」して化学科の Lecturer になった Michele Vendruscolo 氏とは、彼が開発した NMR の化学シフトの計算プログラム Camshift や、化学シフトデータから蛋白質の立体構造を予測する方法などについて議論した。特に、名大の私の大学院生だった森義治君のユビキチンの圧力焼き戻しシミュレーションの結果に森君が Camshift を適用して計算した化学シフトの圧力依存性の結果が北原・赤坂の高圧変性 NMR の化学シフト測定値と見事に一致した結果を見せたら非常に興味を示した。現在、共著論文を準備中である。また、Royal Society University Research Fellow の Robert Best 氏（現在、米国 National Institutes of Health 研究員）とは蛋白質の折り畳みシミュレーションや力場の精度についてよく議論した。特に、名大の私の研究室の博士研究員の榮慶丈君の力場改良法については良い意見交換ができた。更に、Reader の David Wales 氏は元々クラスターの構造最適化をしていたが、最近では生体分子系に彼の Energy Landscape 法を適用しているので、時々彼のグループのティータイムミーティングに参加した。ある時、Wales 研の博士研究員の Sandeep Somani 氏が私の研究室にやってきて、せっかくなので何か拡張アンサンブル法を使った共同研究はできないだろうかと言ったので、彼のやってきた Kirkwood Sampling とレプリカ交換法及び多次元レプリカ交換法（ハミルトニアンのレプリカ交換法）を合体することを提案した。なかなか優秀な人で、どんどん結果を出した。特に、私が 2012 年元旦にケンブリッジを去ったが、冬休み中にもかかわらず、最後の最後（12 月 30 日）まで議論を続けた。この結果は、Wales

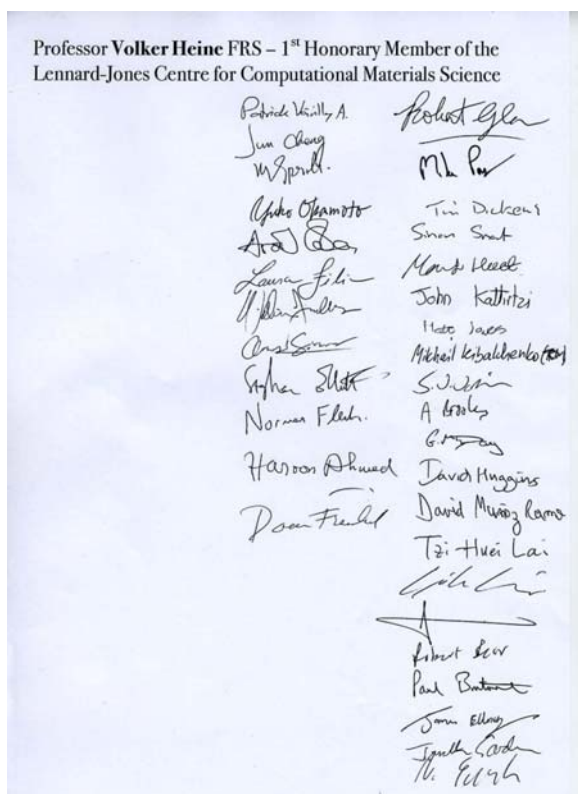


図1：Volker Heine 教授の名誉所員就任に同意する Lennard-Jones 研究センター発足式参加者の署名。ただの訪問者でおこがましいが筆者も署名させて頂いた。以下の URL 参照。
<http://www.ch.cam.ac.uk/news/lennard-jones-centre-computational-material-science-opens>

時間が前後するが、2011 年 11 月には、米国テキサス州の Rice 大学の Peter Wolynes 教授が Linnett Visiting Professor としてケンブリッジの理論化学グループに滞在し、4 回にわたり講義をした。それに合わせて、理論化学グループ主幹の Frenkel 教授から彼の所属する Trinity College（ニュートンが所属したカレッジ）で夕食会を企画したので、図2の招待状が届いた。喜んで参加したが約 20 名（主に理論化学グループのメンバー）が出席した。招待状に lounge suit を着るようにと書いてあった。日本では普段滅多に背広を着ない私は一体どんな服装をすれば良いのか分からなくて少し焦ったが、普通のスーツを着れば良いことが分かりホッとした。学生とフェローと一緒に食事をする大食堂（Hall）ではなく、個室を借り切った食事だったからか、Frenkel 教授を含めて誰もアカデミックガウンを着ていなかった。



UNIVERSITY OF CAMBRIDGE
DEPARTMENT OF CHEMISTRY
Lensfield Road
Cambridge CB2 1EW

20th October 2011

Professor Yuko Okamoto
Department of Chemistry

Dear Professor Okamoto

Professor Peter Wolynes from Rice University is the Linnett Visiting Professor for 2011. Professor Wolynes will give The Linnett Lecture entitled "Landscapes of Matter, Energy and Life" at 3:30 p.m. on Thursday 3rd November in the Pfizer Lecture Theatre, Department of Chemistry, followed by refreshments.

The Linnett Dinner (lounge suits) will follow at 7:00 for 7:30 p.m. that evening in The Allhusen Room, Trinity College. We should be delighted if you would join us for the dinner.

With best wishes,

Daan Frenkel

図2：理論化学グループ主幹の Frenkel 教授から届いた、Peter Wolynes 教授の Linnett Lecture の後の夕食会への招待状。

これとほぼ同じ時期の 2011 年 10 月 19 日から米国 University of California at Berkeley の David Chandler 教授も理論化学グループを約 3 週間訪問した。10 月 25 日に開催された、ある夕食会の帰りに一緒に歩くことになって少し話した。夕食会の時に誰かが Chandler 教授に、Royal Society（日本で言えば学士院に対応するだろうか）の Foreign Member に選ばれておめでとうございますと言っているのが聞こえてきたし、少し前に名工大の磯部雅晴さんにフランクフルトかどこかの空港でばったり会った時に、彼が出席した国際会議で Chandler 教授が溶液に関する賞 (European Physical Society の Liquid Matter Prize) をとったと聞いていたので、「Royal Society 以外にも溶液の賞も受賞されたそうで、おめでとうございます。」と言ったら、「今年は良い年です。」と答えた。また、「一度議論しましょう。」と言ったので、後日彼のオフィスへ行ってみた。彼は、平田文男分子研名誉教授が大いに発展させた reference interaction site model (RISM) の発明者として有名であるが、それ以外にもいろいろと有名な仕事がある。私の研究関係では、transition path sampling という方法が良く知られている。それまでに、米国化学会などで何回か彼の共同研究者の講演を聴いたが、今一良く理解できないでいた。それで、恥ずかしながら、今回議論に行く前に、初めて彼のオリジナル論文を読んでみることにした。そうしたら、大体理解できたので恥をかかずに済んで助かったと思った。彼のオフィスのドアには、「3 週間滞在中ですので、

どなたでも気楽に議論をしに入って来てください」というようなメモが貼られていた。一通り彼の研究内容を聞いた後、私の方は、拡張アンサンブル法による蛋白質の折り畳みや圧力変性に関する計算結果などを見てもらったが、「そのような rare event を出せるはずがない」（正確な言葉を覚えていないので、記憶違いかも知れない）と言って、結果を信用しないような態度を示したので、少し激しい議論となった。1 時間余り話した後、部屋を出た。少し気まずく思ったが、その後も食事などで会った時は、楽しく話はできた。写真 7 は、私のホストの Dobson 教授の St John's College 学長としての肖像画 (portrait) の除幕式の祝賀パーティーの時のものである。



写真 7 : St John's College の Dobson 学長の肖像画の除幕パーティーで完成したばかりの肖像画の前で (2011 年 11 月 2 日, St John's College 学長宿舎にて)。右から, David Chandler 教授, Dobson 学長, Mary Dobson 夫人, 肖像画の制作画家の Paul Hodgson 氏。

このパーティーの時に、制作画家の Hodgson さんに、「写真のように見えますが、どのように描いたのですか？」と聞いたら、「写真を何枚か撮り、描画ソフト photoshop を使って加工した後、最後に筆を入れました。」というようなことを言われたので、「どこに筆を入れましたか？」と聞いたら、「それは秘密です。」と答えた。ちなみにこの肖像画は、St John's College 肖像画委員会の審議を経て、2011 年 12 月半ばから、Hall と Green Room の間の廊下や階段の壁に掲げられている歴代学長の肖像画の一枚となって飾られている。

さて、化学科の話に戻ろう。ケンブリッジには Dobson 教授と並び称される程有名な蛋白質の折り畳みの実験家 Alan Fersht 教授がいた（この時

は既に退官していた）。Fersht 教授は特に、 ϕ 値解析という手法を編み出して、いろいろな蛋白質の各アミノ酸が折り畳みの遷移状態で既に自然の構造を形成しているかどうかを調べた。そして、化学科は、Fersht 教授の研究成果を顕彰するために、写真 8 に示すように、研究対象とされた代表的な蛋白質 barnase の立体構造図を廊下の床に色タイルのモザイクとして銘記したのである。結構大きいもので、幅が 1~2 メートルぐらいあるだろう。しゃれているなと思った。

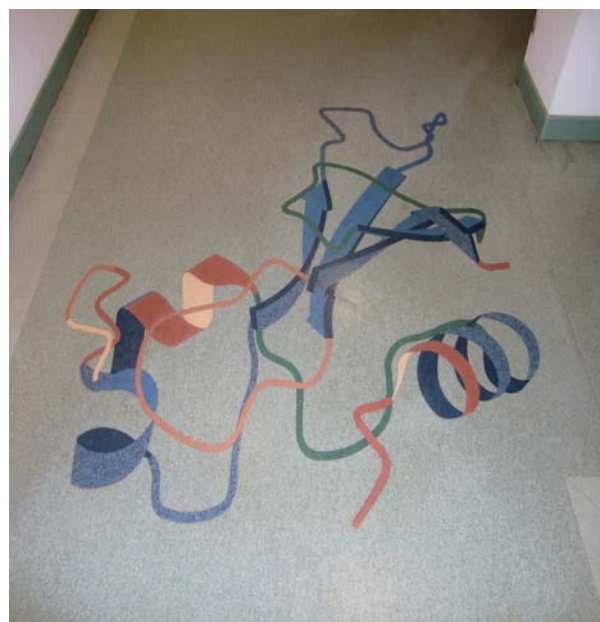


写真 8 : 化学科の 2 つの建物をつなぐ部分の廊下の床に色タイルを使ってモザイク状に描かれた, Alan Fersht 教授が研究した蛋白質 barnase の立体構造の図。

私のヨーロッパ滞在中も終わりに近づいた 2012 年 3 月に数日だけパリからケンブリッジに研究打合せに寄った時に、David Wales 氏が彼の所属する Downing College の昼食に招待してくれた。写真 9 はその時のものである。

以上、私のケンブリッジ滞在中の思い出を記した。他の 2 カ所も学問的にも街も本当にすばらしい所であったが、アカデミックな刺激を受けたという意味では、特にケンブリッジの印象が最も強烈であった。例えば、ケンブリッジからパリに移動した 2012 年 1 月の 1 ヶ月間は、毎晩のようにケンブリッジにいる夢を見た。

最後に、私がサバティカル制度を利用することを快く受け入れ、応援して頂いた、名古屋大学大学院理学研究科物理学教室の皆さんに感謝したい。

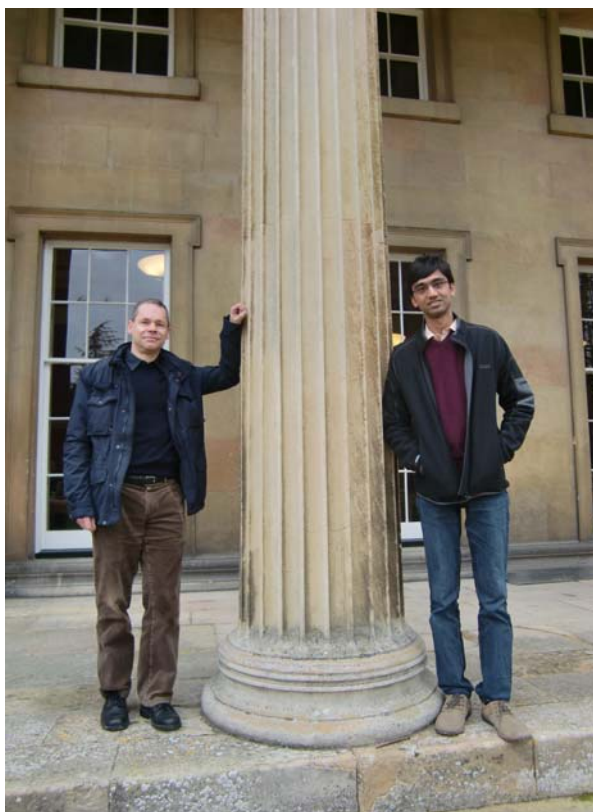


写真 9 : David Wales 氏 (左) が所属する Downing College での昼食に招待されて、右は Wales 研の博士研究員で共同研究をした Sandeep Somani 氏.

著者紹介



岡本祐幸 (Ph.D.) : [経歴] 1984 年コーネル大学大学院理学研究科博士課程修了, 同年バージニア工科大学博士研究員, 1986 年奈良女子大学助手, 1995 年分子科学研究所助教授, 同年総合研究大学院大学助教授 (併任), 2005 年から現所属教授. [専門] 計算生物物理学, 計算化学.