

纳米中心等实空间观测到分子间氢键和配位键相互作用 在国际上首次实现了对分子间局域作用的直接成像

文章来源：国家纳米科学中心

发布时间：2013-09-29

【字号：小 中 大】

国家纳米科学中心的研究人员利用原子力显微镜技术在实空间观测到分子间氢键和配位键相互作用，在国际上首次实现了对分子间局域作用的直接成像。9月26日，《科学》杂志以Science Express在线发表了该项研究成果，并将在几周后以Report形式正式发表。这项研究工作由国家纳米科学中心裘晓辉研究员、程志海副研究员领导的纳米表征与测量研究团队与中国人民大学物理系季威副教授领导的理论计算小组合作完成。

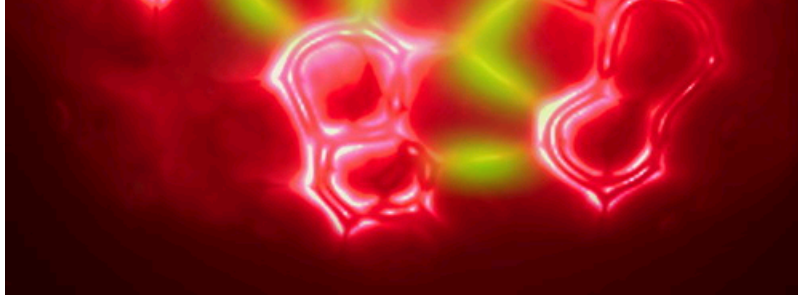
氢键是自然界中最重要的分子间相互作用形式之一。虽然氢键的强度相对于共价键非常弱，但是对物质的性质有至关重要的影响，例如：氢键作用使得水能够在常温下以液态存在、DNA形成双螺旋结构、蛋白质形成二级结构等。长久以来，科学界普遍认为氢键是一种弱的静电相互作用，然而近年来有实验证据显示氢键似乎有类似共价键的特性，即形成氢键的原子间也存在微弱的电子云共享。2011年，国际纯粹与应用化学联合会（IUPAC）推荐了氢键的新定义，但是有关氢键作用的本质这一问题的研究远没有结束。对氢键特性的精确实验测量，如作用位点、键角、键长、以及单个氢键强度，不仅有助于阐明氢键的本质，在原子/分子尺度上关于物质结构和性质的信息对于功能材料及药物分子的设计更有着重要意义。

国家纳米科学中心的研究团队长期坚持自主研发、升级和改造科研装备，通过数年来对商品仪器部件的不断优化，以及自制原子力显微镜的核心部件-高性能qPlus型力传感器，极大地提高了现有设备的稳定性和信噪比，使得该仪器的关键技术指标达到国际上该领域的最好水平。在超高真空和低温条件下，该研究团队通过精确探测原子力探针与分子化学键的电子云之间的Pauli排斥力作用，获得了吸附在铜晶体表面的8-羟基喹啉分子的共价键化学骨架、分子间氢键、以及分子与金属原子配位键的高分辨空间图像，据此精确解析了分子间氢键的构型，实现了对氢键键角和键长的直接测量。

这是科学家第一次获得氢键在实空间的图像，该实验结果对于氢键理论有着非常有意的启示。相对于现有的谱学方法（红外、核磁共振、X射线晶体衍射等），该项研究开辟了一条对氢键研究的崭新实验途径，将对分子间相互作用研究起到巨大的推动作用。

国家纳米科学中心研究生仇君、陈鹏程、袁秉凯参与了本项研究工作。该研究工作得到中国科学院、国家科技部重大研究计划、国家自然科学基金的资助。

Science通过Science Express每周提供若干在两周内被Science录用的最新研究报告，这些文章在4至6周后以在线和印刷形式同时发表在《科学》周刊上。Science现有15%的内容通过Science Express预出版，这些论文通常是编辑推荐的重要文章。



铜晶体表面8-羟基喹啉分子的qPlus原子力显微镜图像（颜色渲染）

[打印本页](#)

[关闭本页](#)