

热点追踪

看，这就是氢键！

本报记者 余惠敏

在开放合作中 提升创新能力

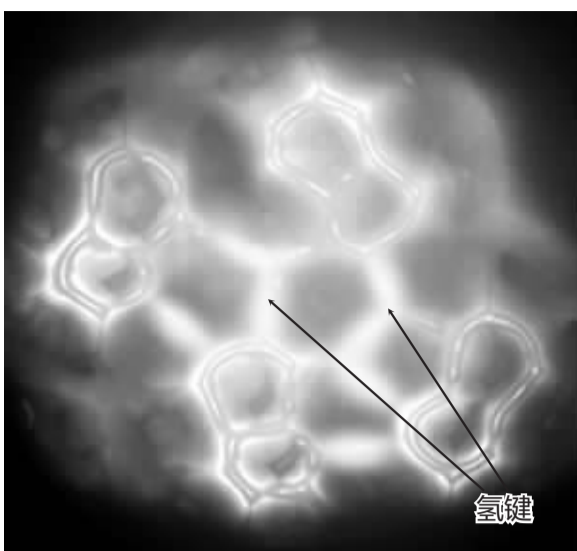
□ 陈宝明

雪花为何总是六只角？DNA为什么能形成双螺旋结构？蛋白质分子何以相互作用？这些有趣问题的答案，都离不开对氢键的认识。科学家们1936年就通过理论分析提出了“氢键”的概念，但一直不能眼见为实。

终于被我国科学家用照片记录下来。国家纳米科学中心研究员袁晓辉、副研究员程志海领导的纳米表征与测量研究团队，拍下了世界上第一张氢键照片。这一成果在今年11月初的《科学》杂志上以论文形式发表后，引起科学界的轰动。《科学》审稿人盛赞此工作“是一项开拓性的发

现，真正令人惊叹的实验测量”，大量国际著名学术期刊和科学媒体纷纷以“第一张氢键照片”，“首次看见氢键”，“首次揭示神秘氢键”等为题，迅速报道了这一革命性成果。

那么，什么是氢键？我们又是如何拍到它的照片？请看本报记者发回的报道。



袁晓辉、程志海团队拍到的世界上第一张氢键照片。他们拍到的是8-羟基喹啉分子之间的氢键。

什么叫氢键

中国人喜欢十全十美，但原子和分子的世界中却遵循“8个才完美”的规律。原子由原子核和电子云组成，当电子在原子核外排列时，会按能量高低在不同轨道，最内圈轨道有2个电子，之后从第二圈起，每排满8个电子就晋位下一圈轨道。

比如，我们厨房里常用的食盐是氯化钠(NaCl)，氯原子和钠原子是如何结合成食盐的呢？

元素周期表上排名11的钠原子含有11个质子的原子核和含11个电子的电子云，电子按2,8,1的数目排列在三个轨道上，最外圈只有1个电子；而排名17的氯原子有17个质子、17个电子，电子按2,8,7排列，最外圈有7个电子。

以8为完美标准，钠原子最外圈多1个电子，氯原子最外圈缺1个电子。所以，当钠原子遇到氯原子，就有一个电子从钠原子处“跳槽”到氯原子那里，让双方都变得完美而稳定。

由于每个质子带一个正电，每个电子带一个负电，这种变化让钠原子变成了带正电的钠离子，氯原子变成了带负电的氯离子，“异性相吸”的钠离子和氯离子之间，就此形成了稳定的离子键。

促使分子形成的力量，除了离子键，还有共价键，二者都属于化学键。

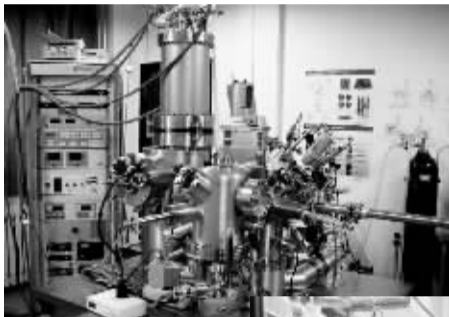
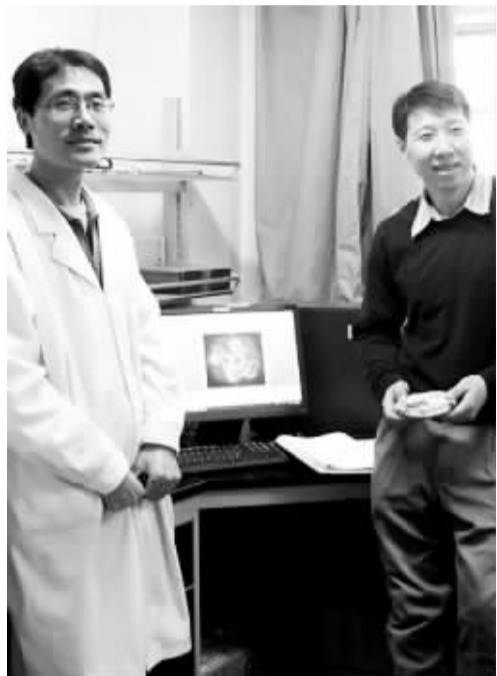
氧气分子(O₂)内部两个氧原子间，就是共价键在起作用。一个氧原子有8个电子，按2,6的数目排列在两个轨道上，当两个氧原子相遇时，都缺2个电子才能达到“外8”的完美。这时候，它们不能像氯化钠那样“损有余以补不足”，就只好采取“共轨双赢”的策略来求平衡——每个氧原子各交出2个电子放到二者的轨道交集上，这样就有4个电子是双方共有，加上各自拥有的外圈剩下的4个电子，正好又达到了“8”。

原子就是这样，通过离子键或者共价键这样的化学键来组成分子。那么，如果遇到极端情况呢？比如，只有一个电子的氢原子，当它与其他原子结合，不得不把“独生”电子交出去时，它的原子核岂不就要“裸奔”了么？

我们日常生活中常见的水分子(H₂O)，就是由一个氧原子和两个氢原子组成，连接它们的是共价键。当1个电子的氢原子，碰到8个电子的氧原子时，每个氢原子都出1个电子，与氧原子外层的1个电子“共轨”，这样，只有最内层电子轨道的氢原子达到了内“2”的平衡，而最外层轨道有6个电子的氧原子，在跟两个氢原子各共用两个电子后，又达到了“外8”的平衡。

水分子是性质特殊的极性分子，这是因为在水分子中，“共轨”的电子只能在氧原子和氢原子之间结合的那一侧存在，形成电子云，氢原子对外的那一侧因为没有电子，而把带正电的原子核裸露出来。如果把水分子看做一个大脑袋小人，这个小人的大脑袋氧原子就带着负电，而两只脚氢原子带着正电。这样，当不同的水分子相遇时，因为正负电荷的相互作用，这个水分子的脑袋会倾向于和那个水分子的脚丫子“异性相吸”，最后形成一大团水的聚合体。这种水分子间的作用力就叫“氢键”，是氢原子对外裸露而产生的分子间的弱相互作用。

“氢键相当于两个人手拉手，可以拉也可以分，它在本质上和化学键不同。化学键连接的是你自己的手和脚，不能分开。”袁晓辉这样解释二者之间的区别。“氢键就是半裸的氢原子核作为桥，把分子拉到一起。所以有氢键的分子中必须有氢原子。”



▲ 图为由我国科学家改装并拍到世界上一张氢键照片的非接触式原子力显微镜。

▲ 袁晓辉(右)、程志海(左)在实验室合影。
▶ 博士生陈鹏程在显微镜下制作探针。
本报记者余惠敏摄

怎么看到氢键

由于氢是自然界中普遍存在的元素，氢键就成了自然界中最重要，存在最广泛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，但对物质的性质有至关重要的影响——氢键作用使水在常温下以液态存在，使冰能够浮在水面上，使雪花成为六角形，使DNA形成双螺旋结构、使氨基酸组成蛋白质大分子……

正因为氢键如此重要，“看到”氢键就成为化学、生命科学、药理学等多学科专家们的心愿。

然而，看到氢键又何等困难！早在1936年出版的《化学键的本质》一书中，诺贝尔化学奖获得者鲍林就提出了氢键概念。一个多世纪过去了，人们对氢键特性的研究主要借助于X射线衍射、拉曼光谱、中子衍射等技术进行间接分析，从来没有真正地看到过氢键。

要看到氢键，需要进入原子的世界，而原子非常小，一亿个原子手拉手站成一排，才有人类手指头那么宽。我们要用什么来触摸原子世界？

用原子来探查原子。

1986年的诺贝尔物理学奖被授予电子显微镜和扫描隧道显微镜的设计者。人们借助扫描隧道显微镜成像，第一次看到了原子。扫描隧道电子显微镜已经成为许多实验室的常规装备，其原理，是将电荷放置在探针针尖上，针尖细到只有一个原子，当探针扫过被测物的单个原子，流过探针的电流便有所不同，通过电流的涨落，便描出原子的轮廓。

为了实现更高分辨率，2007年国际上出现了原子力显微镜，针尖还是单个原子，但不再探测电流——研究人员用振动的探针靠近样品，当针尖原子与样品原子离得很近，电子云发生重叠时，就产生了原子间的泡利排斥力，使探针振动频率发生偏移，再检测探针频率就能得到扫描图像。由于共价键上有电子云分布，能产生泡利排斥力，人们就使用这种显微镜在2009年看见了原子间的共价键。

不过，比共价键弱很多的氢键，虽然也有电子云分布，却还没有被人们看到。2007年，袁晓辉、程志海团队从德国进口了一台通用的商业化扫描探针显微镜，然后对其进行“改装”。“我们把它改

成了超高真空低温扫描探针显微镜。真空是为了排除干扰。低温是为了把分子冻住，不让他乱跑，这样才能成像。”袁晓辉说，实验组把显微镜改装成非接触原子力显微镜，国际上仅有三五五个课题组能达到此种水准。

改装后，机械噪音被降低了3-5倍，电子学噪音被进一步降低。最重要的是，他们用自己技术，自制了原子力显微镜的核心部件——高性能的原子力传感器，也就是那个关键的探针，极大地提升了现有设备的稳定性和信噪比。“探针的振动幅度被降低到一个埃米，小于化学键键长。整套机器的图像分辨率在改装后提高了100倍。”

在实验室，记者看到正在制作探针的博士生陈鹏程。他以6毫米长、2毫米宽的石英表音叉为原料，将钨探针粘接到谐振频率稳定的石英音叉上，先在普通显微镜下磨出几个纳米细的钨针尖，再放到真空显微镜中拉出一个钨原子的探针尖。

“探针的尖是一个原子，必须拉出一个原子来，才能清晰成像。如果针尖上有两个钨原子，就会出现双影。一个探针，熟手也要花4-5个小时制作，运气好时能用三个月，运气不好一天就坏了。”袁晓辉说，“我们经历过无数次失败，然后不断改进。当第一次看到清晰的氢键图像时，我们知道这是世界上第一张，感觉非常充实和自豪。”

看到氢键以后

国家纳米中心2003年成立，是中国科学院和北京大学、清华大学共建的科研机构。拍到第一张氢键照片，是纳米中心成立10年来的几个最重要发现之一。

“纳米技术的发展日新月异，超越想象，人类可以看到原子、分子、化学键，甚至现在看到氢键。”国家纳米中心主任刘鸣华说，千言万语不如一图，氢键的高清晰度照片能帮助科学家们理解其本质，进而为控制氢键、利用氢键奠定基础。在此基础上，我们未来有可能人工影响或控制水、DNA和蛋白质的结构，生命体和我们生活的环境也可能因此而改变。“如支撑DNA双螺旋结构的就是氢键，一个三重氢键，一个两重氢键，氢键还能解开和复制，在生命遗传中起到非常重要作用。”

通过用自主创新技术改装成的非接触原子力显微镜，我国科学家用纳米技术实现了对分子的共价键化学骨架、分子间氢键以及分子-金属原子间配位键的超高分辨率成像。并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。该项研究方法开辟了一条崭新的实验途径，在分子间相互作用的机理研究领域有广阔的应用前景。

“这套设备不止可以拿来观察氢键。”袁晓辉表示，“比如说，下一步我们可能用它来观察卤素键，卤素是化学催化剂中常用的，与氢键相比，卤素键含量更低、信号更弱，活性更强，需要用更低温度冻住，对它的观察需要让我们这套设备的各项性能更进一步提高。”

非接触原子力显微镜这项技术目前只能在超低温和高真空环境下使用，未来如果这项技术被推广到自然环境下应用，成为各行业科技工作者的常用研究手段，人们又将对这个世界的本质有更深刻的理解和利用。

<h3>离子键就是：电子脱手了！</h3> <p>我多一个电子 我缺一个电子</p> <p>离子键：盐 (NaCl)</p>	<h3>共价键就是：电子兼职了！</h3> <p>我缺俩电子 我也缺俩电子</p> <p>每人出俩，共享</p> <p>共价键：氧气 (O₂)</p>	<h3>氢键就是——</h3> <p>让你的电子兼职去了， 半裸的笔核求温暖~</p> <p>我们是一家人</p>	<h3>离子键和共价键都是化学键。是分子内部结构。</h3> <p>我们是朋友</p>	<h3>非接触原子力显微镜——用原子来探查原子</h3> <p>只有100,000,000个原子</p>
--	--	---	---	--

氢键是分子之间的交流，可以拉手，也可以放手。

为什么DNA可解开可复制？就因为氢键可拉手也可放手。

创新本身是开放的。我国提出自主创新战略，绝不是关起门来搞创新。随着经济全球化深入发展，企业越来越多地通过加强对外合作和利用外部创新资源获取竞争优势。但是，在对外开放和合作中，企业只有不断提高自主创新能力，才能实现创新能力内在化，真正发挥科技对企业发展的支撑引领作用。

长期以来，我国一些产业的发展面临着核心技术受制于人的瓶颈，重要的装备、核心部件以及控制系统等主要依靠进口。比如，2012年，我国进口芯片约1650亿美元，超过了进口石油的金额；我国新能源产能增长很快，但是装备的关键部件主要依赖进口。为了解决产业发展的核心技术瓶颈问题，我国先后实行了“市场换技术”、“股权换技术”等多种手段，实际的结果是市场和股权让出去了，技术却难以换得到。“市场换技术”、“股权换技术”采取的都是对外开放合作的方式，但是没有取得预期的效果，原因就在于没有把对外开放合作变成提高自身创新能力的机会，在合作中失去了创新的动力，甚至失去了原有的创新基础和能力。

反观我国有些企业，在利用国际创新资源中把提高自主创新能力作为重要目标，充分利用了开放合作所提供的机会，提高了自身的研发水平和技能，形成了知识和技术的积累，真正在更高起点上推进了自主创新，为企业的发展奠定了良好的基础。

例如，奇瑞汽车公司是汽车行业的后起之秀，技术水平、研发能力与传统汽车厂商相比，毫无优势可言，很多技术都是依靠从外部引进。奇瑞在发展过程中，委托意大利、德国和日本的设计公司开发新车型，都是明确提出要联合开发，在联合开发过程中以掌握核心技术为前提，牢牢把握主动权。奇瑞在与世界一流的发动机设计公司奥地利AVL公司合作研发发动机过程中，最初的几款发动机机由外方技术专家主导来做，中方工程师跟着学；而后的几款发动机设计则由中方工程师来承担能做的部分，不能独立完成的部分由外国专家指导完成；最后的10多款发动机基本上都是由自己的工程设计人员来完成。奇瑞在联合研发过程中不断培养自己的人才，最后实现了设计、开发水平大幅度的提升。奇瑞给我国的企业提供了一个通过合作研发提升自主创新能力的典型案例。

再如，我国三峡总公司在三峡工程建设左岸14台机组招标中，明确提出了投标者必须与中国制造企业联合设计、合作制造，必须向中国制造企业全面转让核心技术，培训中方技术人员，中国制造企业分包份额不低于合同总价的25%，14台机组中的最后2台必须由中国企业为制造商的要求。这些措施保证了我国国内企业完整地引进了核心技术，大大提高了设计制造能力。在修建右岸电站机组中，我国企业与国际水电巨头同台竞争，凭借自身的实力，各自承担了右岸电站4台水轮发电机组的设计制造任务。我国的哈电、东电通过引进消化吸收再创新实现了特大型机组的国产化，在许多重要技术参数上还超过了国外企业。三峡工程建设给我国企业提供了在技术引进中通过消化吸收提高自主创新能力的典型案例。

近年来，我国还有一些企业通过海外并购获取了国外核心技术，对提升创新能力、获取新的竞争优势发挥了重要作用。2006年，长虹集团收购了韩国第三大等离子制造商欧丽安公司75%的股权，该公司不仅拥有全球独一无二的无缝拼接等离子显示器(Multi-PDP)技术，而且拥有300多项等离子专利，其中多项核心专利所有等离子厂家都在使用。并购后，长虹整合技术资源，形成了以位于四川绵阳的虹欧公司为核心、北京PDP研发中心和韩国PDP研发中心为技术支撑的等离子研发体系，实现了等离子技术的整合创新，解决了技术来源和技术升级问题；长虹还通过签订技术协议，使大量核心技术人员派驻国内，支持绵阳工厂建设和产品开发。长虹集团给我国企业提供了通过海外并购提升自主创新能力的典型案例。

这些企业，在合作研发、技术引进与海外并购等过程中，通过利用国际创新资源，在更高的起点上提升了创新能力，为企业的长远发展奠定了基础，他们的做法值得我国企业借鉴。

一是企业在对外开放合作中，应对利用国际创新资源提升创新能力进行总体谋划和设计，使开放合作成为提升企业创新能力的一个重要手段。

二是转变产学研合作的方式，由委托研发转变为更多的机构合作。当前，我国产学研合作以委托研发为主，交钥匙工程较为普遍，企业应在此基础上更加重视长远合作，通过机构之间的合作，比如共建研发机构，来提升企业创新能力。

三是在合作中加强人才的培养和交流。人是最有创新活力的因素，在对外合作中加强人才的培养是提升企业创新能力的根本。通过开放合作，要使企业研发人员有更多的交流和学习机会，也要给企业研发人员成长和施展才干的空间，这样才能在提升人才创新能力的同时提升企业的创新能力。

四是加强数据积累和平台建设。在对外开放合作中，应沿着企业创新路径，通过利用外部创新资源弥补自身不足，形成企业自身的数据积累和研发平台，从而增强企业的持续创新能力。

当然，关键在于因地制宜，要根据企业发展的实际情况，选择最有利于提升自身创新能力的开放合作方式。

(作者为中国科学技术发展战略研究院综合发展研究所副所长、研究员)

本版编辑 钟春华 殷立春

