

## “无处不在”的非共价相互作用 ——弱作用迸发大能量

张希瑶<sup>1</sup>, 杨栋<sup>1,\*</sup>, 赵捷<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> 西北大学化学与材料科学学院, 化学国家级实验教学示范中心, 西安 710127

<sup>2</sup> 西安建筑科技大学化学与化工学院, 西安 710055

**摘要:** 非共价相互作用包括氢键、静电相互作用、疏水效应、 $\pi$ 共轭效应和范德华力等。虽然这些相互作用比共价键弱, 但在我们的日常生活中却无处不在, 时时刻刻都在大显身手。本文通过生活对话的形式, 简要介绍了生活中以非共价相互作用主导的现象和用品, 希望通过生活实例加深读者对超分子化学领域相关知识的认识和理解, 让公众感受超分子化学中奇妙的分子艺术。

**关键词:** 超分子化学; 非共价相互作用; 范德华力; 氢键

**中图分类号:** G64; O6

## The Ubiquitous Noncovalent Interactions: Weak Interactions Unleashing Great Energy

Xiyao Zhang<sup>1</sup>, Dong Yang<sup>1,\*</sup>, Jie Zhao<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup> National Chemistry Experimental Teaching Demonstration Center, College of Chemistry and Materials Science, Northwest University, Xi'an 710127, China.

<sup>2</sup> School of Chemistry and Chemical Engineering, University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China.

**Abstract:** Noncovalent interactions encompass hydrogen bonding, electrostatic interactions, hydrophobic effects,  $\pi$ - $\pi$  interactions, and van der Waals forces, among others. Despite being weaker than covalent bonds, these interactions pervade our daily lives, showcasing their significant influence at every moment. This article adopts a conversational format to briefly introduce everyday phenomena and objects driven by noncovalent interactions. Through practical examples, we aim to deepen readers' knowledge and understanding of the field of supramolecular chemistry, allowing the public to appreciate the marvels of molecular art within supramolecular chemistry.

**Key Words:** Supramolecular chemistry; Noncovalent interactions; Van der Waals forces; Hydrogen bonds

这天, 刚上大学的小华在刷碗时听着电视机里的化学科普节目, 被一个定义深深吸引——非共价相互作用, 这引起了一直对化学保持着浓厚兴趣的小华的注意, 他转头问坐在沙发上的妈妈: “妈妈, 我知道分子是原子间通过共价键形成的稳定结构, 那非共价相互作用是什么呢?”

妈妈摸了摸小华的头, 笑着说: “与共价相互作用不同的是, 非共价相互作用并不是通过共用电子对形成化学键, 而是分子内或者分子间正负电荷间相互作用形成的一种作用力<sup>[1]</sup>, 非共价相互作用包括静电作用、 $\pi$ 共轭效应、范德华力以及疏水效应等, 我们所熟知的氢键作用也是非共价相互

收稿: 2024-04-22; 录用: 2024-06-11; 网络发表: 2024-11-01

\*通讯作者, Emails: yangdong@nwu.edu.cn (杨栋); zhaojie@xauat.edu.cn (赵捷)

基金资助: 陕西省师德师风建设基地(西北大学)研究课题(XD2024SD10)

作用的一种。”小华被妈妈的回答深深震撼，接着问道：“那人们是怎么意识到非共价相互作用也可以在物质世界起重要作用的呢？”妈妈想了想说道：“虽然非共价相互作用大家可能很少听到，但是在生活中却无处不在。在20世纪50年代，我们身体里携带遗传信息的双螺旋DNA中的碱基对被证实是通过氢键这种非共价作用而形成的聚集体分子(图1)，这种由弱相互作用力驱动形成的稳定天然大分子的有趣组装过程，激发了科学家们对通过非共价相互作用形成不同结构和物质的进一步探索<sup>[2]</sup>。”

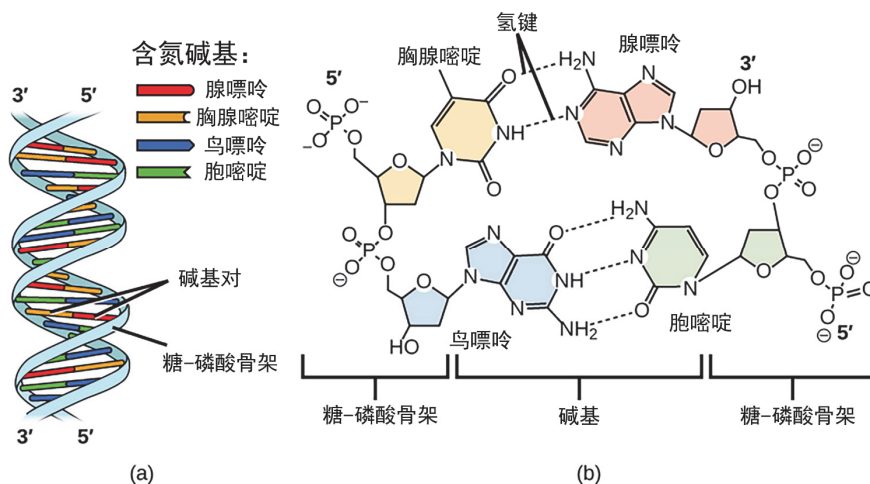


图1 (a) DNA双螺旋结构图；(b) 碱基对内部氢键示意图

小华又激动地说道：“那生活中也有很多以非共价相互作用为主导的例子吧！”妈妈看着小华洗干净碗点了点头说：“当然啦，洗洁精能带走碗中的油脂就是很好的例子呀！”

## 1 洗洁精高效清洁力的奥秘

小华开始注意到被洗洁精带走的油污，不太懂其中原理的小华又用清水刷了一个碗，发现碗上的油脂怎么洗都洗不掉，“还是洗洁精厉害，但是为什么洗洁精能把油脂带走，水却不行呢？”小华急切地想知道其中的奥秘。

“这是因为油脂分子有自己的偏好，不能与水混溶。而洗洁精的主要成分——烷基磺酸钠<sup>[3]</sup>则是一位优秀的调解员，被称为表面活性剂。还有其他洗涤剂比如肥皂、洗衣粉，正是在表面活性剂的帮助下，才能清除各种污垢，让油脂分子和水分子能够‘融洽相处’。”妈妈解释道。小华又接着问道：“那这个洗洁精里的调解员是怎么调解的呢？”妈妈继续解释道：“要了解一种物质的性质，就要从分子结构入手，这些表面活性剂的组成是高级脂肪酸的钠盐。其分子可分为两部分：一部分是极性磺酸基，易溶于水，亲水疏油，称为亲水基团；另一部分是非极性烃基，不溶于水，溶于油，具有亲脂性和疏水性，称为疏水基团。

“当洗洁精溶于水时，洗洁精分子的亲水性磺酸基部分趋向于进入水中，而疏水性烃基部分排斥水面，形成洗洁精分子的定向排列。这层高级脂肪酸盐的存在削弱了水分子在水面上的张力，因此洗洁精可以大大降低水的表面张力，是一种表面活性剂。当洗洁精在水中的浓度较低时，洗洁精分子呈单分子形式，这些分子聚集在水面上，即亲水基团进入水中，疏水基团被排斥在水的外面。

“当水中洗洁精的浓度逐渐增大时，水的表面上聚集的表面活性剂分子逐渐增多而形成单分子层。继续增大洗洁精的浓度时，由于洗洁精分子已经占满了水的表面，水溶液内部的洗洁精分子中憎水烃基的一头开始彼此靠范德华力聚集在一起，而亲水的磺酸基裸露在外面，形成胶体大小的球状聚集粒子，称为胶束(图2)。这种胶束位于油水界面处，可改变界面状态，促进乳化，使油相和水

相宏观混合，洗净物品<sup>[4]</sup>。”

小华听完之后连连感叹：“原来洗洁精里蕴含这么多化学知识，弱相互作用范德华力也能有大作用！”

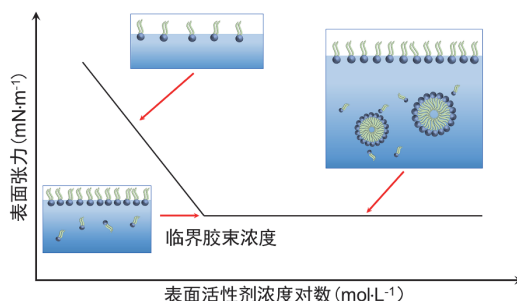


图2 洗洁精胶束示意图

## 2 面霜中的非共价相互作用

听完妈妈的解释之后，小华手里的碗也基本洗好。一抬头，他注意到妈妈脸上痘痘已经好多了，他惊喜地喊道：“妈妈，您脸上的痘痘最近少了很多，看起来皮肤也更有光泽了！”听到小华的喊声，妈妈顺势照了照镜子，告诉小华：“是呀，最近用的面霜很有效，这么小的一瓶面霜也有你感兴趣的弱相互作用知识呢！”

小华盯着小小的一瓶面霜，仿佛想通过看就能知道其中的化学奥秘，妈妈继续说道：“这个面霜主要成分是壬二酸<sup>[5]</sup>和烟酰胺(即3-吡啶甲酰胺)<sup>[6]</sup>。壬二酸呈弱酸性，针对性解决痘肌问题——角质过厚、毛囊过度角化，溶解部分粉刺，降低粉刺的生成，通过抑制细菌合成蛋白质起到抗菌效果。烟酰胺是烟酸的吡啶衍生物，是一种水溶性较好的B族维生素，又称维生素B3。3-吡啶甲酰胺具有抑制皮肤黑色素沉淀、加快细胞更新换代、抗氧化、抗炎、美白和细致皮肤等多种作用，因而在化妆品领域常用于脸部皮肤美容，深得消费者的喜爱和肯定。并且水溶性好，易被人体吸收。

“由于1,9-壬二酸的水溶性差，在合成过程中很难均匀地分布在以水为溶液的护肤品中，容易造成产品不稳定、储存困难等问题，同时导致皮肤无法很好地吸收产品，降低产品功能效果；且1,9-壬二酸刺激性强，在使用过程中容易导致使用者皮肤刺激泛红。因此，需要采取一定的措施来提高1,9-壬二酸的溶解度及降低其刺激性。在化妆品领域，共晶是一种改善共晶前驱体的水溶性、代谢稳定性、分散速率和生物利用度等理化性质的有效方法，通过氢键、静电作用和其他非共价键等力的作用下结合而形成的晶体，是一种具有生物活性的全新固体原料。科学家选用3-吡啶甲酰胺为共晶形成物，与1,9-壬二酸反应形成3-吡啶甲酰胺1,9-壬二酸共晶体，以此来提高1,9-壬二酸的溶解度及降低其刺激性，满足其在医药化妆品领域中的应用要求。

“在资料中了解到两者共晶的结合方式主要为分子间氢键的作用。其中3-吡啶甲酰胺吡啶环上的N原子与1,9-壬二酸一端羧基中的—OH基团可以形成O—H···N氢键；3-吡啶甲酰胺上的羰基O原子与1,9-壬二酸另一端羧基中的—OH基团也可以形成O—H···O氢键；3-吡啶甲酰胺吡啶环上的—NH<sub>2</sub>与1,9-壬二酸一端的羰基O原子会形成N—H···O氢键(图3)。

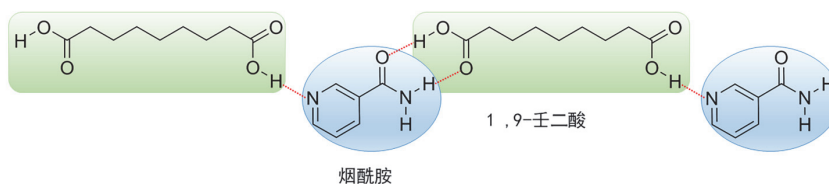


图3 烟酰胺和1,9-壬二酸氢键示意图

“分子中其余的苯环和碳氧双键通过 $\pi\cdots\pi$ 堆积呈现并行排列状态，且层与层之间通过静电作用和疏水作用不断重合排列。共晶原料在水系溶剂中的均匀分散，提高了人体肌肤对其的利用度，同时降低产品在使用过程造成的刺激反应，使得产品更加温和安全<sup>[7]</sup>。”

原来小小的一瓶面霜也有这么大的学问，怪不得妈妈脸上的痘痘变好了这么多，皮肤也细腻了不少，小华默默在心里想道。

### 3 越嚼越甜的米饭——唾液作用下的化学变化

一会要出门和朋友聚会的小华想着一定要和朋友分享这无处不在的非共价相互作用。时间已经临近中午，妈妈叫小华抓紧吃饭，肚子已经咕咕叫的小华急忙夹了一口米饭放到嘴里，咀嚼了一会发现米饭竟然有丝丝甜味，这还与吃糖时候感受到的甜并不一样，是咀嚼了一会才会有的，小华这时已经沉迷于思考其中所包含的化学变化。妈妈端着菜过来的时候看着小华一脸愁容，不禁问道：“怎么了小华？在想什么这么入迷？”小华把疑惑说给妈妈听，妈妈笑着说：“这是因为你的嘴里分泌了一种神奇物质，它会催化你吃的馒头‘水解’。”小华回想到高中生物课上仿佛说过这个过程，“是唾液淀粉酶吗<sup>[8]</sup>？”小华问道。

妈妈欣慰地摸了摸小华的头：“答对啦！淀粉本身是没有甜味的，当人的口腔接触包含淀粉的食物时，会分泌唾液淀粉酶，唾液淀粉酶会催化淀粉水解成可以尝出甜味的小分子糖，这个过程是非共价作用主导的。唾液淀粉酶被发现是蛋白质大分子后，科学家们了解到它并不是单一结构，唾液淀粉酶还分为 $\alpha$ -淀粉酶<sup>[9]</sup>和 $\beta$ -淀粉酶<sup>[10]</sup>等，这些酶能作用的淀粉各不相同，但其中的作用过程以及机理大同小异。以 $\beta$ -淀粉酶为例，当有淀粉出现时，会通过氢键作用、静电作用和疏水相互作用特异性结合直链型淀粉，酶的表面有着特异性结合位点，结合含有特定基团的淀粉底物，所以酶具有绝对特异性，酶会结合一类淀粉，这称为相对特异性。在结合含有同种基团但是形状不同的底物淀粉时，酶会改变自己的形状去适应底物分子，这称为‘诱导契合’<sup>[11]</sup>，而后形成一种酶和底物的复合物。在此状态下， $\beta$ -淀粉酶会催化直链淀粉上的 $\alpha$ -1,4键水解，最后水解成口腔能感受到甜味的麦芽糖和葡萄糖<sup>[12]</sup>，反应结束当产物从酶上脱落下来后，酶的活性中心又恢复了原来的构象，并可重复利用，催化下一个分子(图4)。”

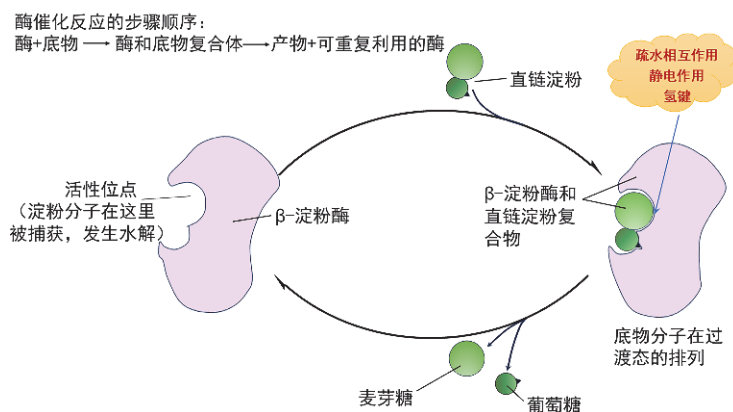


图4  $\beta$ -淀粉酶结合直链淀粉示意图

小华听了妈妈的讲解后更加深刻地感受到了非共价作用的神奇力量，感受着口中的甘甜味道，小华逐渐体会到生活中非共价相互作用的趣味性。

### 4 结语

“那我出门了，妈妈！”小华出了家门后，回想今天学到的知识，通过范德华力让水分子和油分

子能相处融洽的表面活性剂；壬二酸和烟酰胺两种物质之间通过氢键作用共晶后，既能促进壬二酸在水里溶解，也可以同时发挥两种物质作用的神奇面霜；再到淀粉酶可以通过氢键等非共价相互作用特异性结合淀粉，让本身没有甜味的淀粉变甜。一个个有关于非共价作用在生活中的实例的思绪慢慢飘了出来，小华被化学所散发的魅力深深吸引，开始思考，是不是通过这种非共价作用可以在医学领域选择性地结合一些药物小分子运送到特定的部位呢？这种弱相互作用是不是可以形成丰富的结构用来封装海洋中那些有危害的物质呢？小华知道还有许多有关于非共价相互作用的化学奥秘等着他去探索……

#### 参 考 文 献

- [1] Schneider, H.-J. *J. Phys. Org. Chem.* **2022**, *35* (7), e4340.
- [2] Fowler, S.; Roush, R.; Wise, J. *Concepts of Biology*; OpenStax: Houston, Texas, USA, 2013; p. 200.
- [3] 张文馨, 严新, 王清清, 张齐齐, 褚玉婷, 陈煜. *广州化工*, **2022**, *50* (19), 103.
- [4] 奚弦, 蒋曙光, 张卫清, 秦桐. *应用化工*, **2018**, *47* (7), 1339.
- [5] 马秋华. 壬二酸衍生物凝胶治疗黄褐斑的研究[硕士学位论文]. 济南: 山东中医药大学, 2009.
- [6] 刘露, 白利强, 李炆. *日用化学品科学*, **2023**, *46* (4), 40.
- [7] 王振元, 张嘉恒, 王天晓, 李嘉奇, 干瑞靖, 吴称玉. 一种壬二酸与有机碱的共晶及其制备方法、应用: 中国, CN202011506788.5. 2022-02-11.
- [8] 李奇, 罗兴有, 马红梅. *现代食品*, **2020**, No. 13, 102.
- [9] 张娜英, 杨广宇. *生物工程学报*, **2023**, *39* (3), 898.
- [10] 汪薛良, 钮成拓, 包敏, 李崎, 王金晶. *东北农业大学学报*, **2019**, *50* (2), 56.
- [11] 张子剑, 潘荣, 周园, 赫荣乔. *生物化学与生物物理进展*, **2011**, *38* (5), 418.
- [12] 黄强, 陈磊, 扶雄. *华南理工大学学报(自然科学版)*, **2013**, *41* (10), 60.