

新的异体四氢键二聚体结构的理论研究

周艳霞,赵新,黎占亭,陈光巨,刘若庄

北京师范大学化学系,北京(100875);中国科学院上海有机化学研究所,上海 (200032)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 研究了一系列由不同单位通过DAAD-ADDA方式结合的新的异体二聚体体系。运用密度泛函B31YP方法在3-21g水平上完全优化了单位和二聚体的结构,通过对体系的结构特征、能量、相互作用能的分析研究,证实了这类新的超分子聚集体可通过四重氢键自组装形成。

**关键词** [二聚体](#) [氢键](#) [聚集体](#) [超分子结构](#)

分类号 [064](#)

## Theoretical Study for the Structural Characteristics of Novel Quadruply Hydrogen Bonded Heterodimers

Zhou Yanxia,Zhao Xin,Li Zhanting,Chen Guangju,Liu Ruo Zhuang

Department of Chemistry, Beijing Normal University, Beijing(100875)

### Abstract

**Key words** [DIMER](#) [HYDROGEN BONDS](#) [AGGREGATES](#) [SUPERMOLECULAR STRUCTURE](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

### 服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

### 相关信息

▶ [本刊中包含“二聚体”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [周艳霞](#)
- [赵新](#)
- [黎占亭](#)
- [陈光巨](#)
- [刘若庄](#)