

基于 5-(4-(2,6-二(2-吡啶基)-4-吡啶基)苯氧基)间苯二甲酸的 Ni(II)和 Cd(II)配位聚合物的合成与晶体结构

王桂仙^{1,2} 曹可利² 陈飞燕² 冯云龙^{*,2}

(¹ 丽水学院化学与化工学院, 丽水 323000)

(² 浙江师范大学物理化学研究所, 金华 321004)

摘要: 用溶剂热法合成了 2 个以 5-(4-(2,6-二(2-吡啶基)-4-吡啶基)苯氧基)间苯二甲酸(H₂L)为配体的金属-有机配位聚合物: $[\text{NiL}(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**1**), $[\text{CdL}(\text{phen})]_n$ (**2**)。通过 X-射线单晶衍射, 元素分析和红外光谱进行了结构表征。结构分析表明, 在 **1** 中, L²⁻ 配体的 2 个羧基氧原子桥连相邻的 2 个 Ni(II) 离子, 形成平行于 *a* 轴的一维链, 链间则通过吡啶氮原子与金属离子连接, 最终形成具有 (4,4)-连接三维网络结构。在 **2** 中, Cd(II) 为七配位的单帽三棱柱几何构型, L²⁻ 配体通过 2 个羧基和 1 个吡啶基与 3 个中心金属 Cd(II) 相连, 形成 (3,3)-连接的二维层面结构, 又通过面间的 $\pi \cdots \pi$ 堆积作用形成了 3D 超分子结构。测定了配位聚合物的热稳定性和 **2** 的荧光性质。

关键词: 配位聚合物; 5-(4-(2,6-二(2-吡啶基)-4-吡啶基)苯氧基)间苯二甲酸; 晶体结构; 荧光性质

中图分类号: O614.81⁺3; O614.24⁺2

文献标识码: A

文章编号: 1001-4861(2016)01-0043-06

DOI: 10.11862/CJIC.2016.003

Syntheses and Crystal Structures of Ni(II) and Cd(II) Coordination Polymers Based on 5-(4-(2,6-Di(pyrizin-2-yl)pyridin-4-yl)phenoxy)isophthalic Acid

WANG Gui-Xian^{1,2} CAO Ke-Li² CHEN Fei-Yan² FENG Yun-Long^{*,2}

(¹Department of chemistry and chemical engineering, Lishui University, Lishui, Zhejiang 323000, China)

(²Zhejiang Key Laboratory for Reactive Chemistry on Solid Surfaces, College of Chemistry and Life Science, Zhejiang Normal University, Jinhua, Zhejiang 321004, China)

Abstract: Two new metal-organic coordination polymers $[\text{NiL}(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**1**), $[\text{CdL}(\text{phen})]_n$ (**2**) (H₂L=5-(4-(2,6-di(pyrizin-2-yl)pyridin-4-yl)phenoxy)isophthalic acid) have been synthesized under solvothermal conditions and characterized by single crystal X-ray diffraction analysis. Complex **1** features a (4,4)-connected 3D network. The carboxylate groups of the L²⁻ ligands bridges two Ni(II) ions into one 1D chain, then the neighboring chains are further interconnected by the N atoms of the L²⁻ ligands to generate a 3D net. Complex **2** displays a (3,3)-connected 2D framework and further linked by $\pi \cdots \pi$ interactions between aromatic rings with a centroid-centroid distance of 0.365 2 nm into the final 3D net, in which the Cd(II) is seven-coordinated in one-capped trigonal prismatic geometry. Thermogravimetric analyses (TGA) have been measured for **1** and **2**. Luminescent properties of **2** were investigated. CCDC: 1406238, **1**; 1406239, **2**.

Keywords: coordination polymer; 5-(4-(2,6-di(pyrizin-2-yl)pyridin-4-yl)phenoxy)isophthalic acid; crystal structure; luminescent property

收稿日期: 2015-06-12。收修改稿日期: 2015-09-12。

国家自然科学基金(No.21173197)资助项目。

*通信联系人。E-mail: sky37@zjnu.cn; 会员登记号: S06N0984M1401。

0 引言

金属-有机配位聚合物作为一种新型的分子功能性材料,因其结构具有独特的可塑性、拓扑结构的多样性^[1],以及在气体的吸附与分离^[2]、催化^[3]、荧光^[4]等^[5]领域具有潜在的应用前景,已受到学术界的广泛关注。在制备具有特定结构和功能的配位聚合物策略方面,人们必须同时考虑配体的设计、金属离子的选择以及反应条件的控制。吡啶羧酸类配体既有含 N 的吡啶基又有含 O 的羧酸基,兼具独特的吡啶和羧酸的双功能特性,具有丰富的配位形式和较强的配位能力而受到学术界的关注。本课题组基于吡啶羧酸类配体构筑的配位聚合物的合成与性能研究,得到了一系列研究成果^[6]。本文报道 2 个 5-(4-(2,6-二(2-吡啶基)-4-吡啶基)苯氧基)间苯二甲酸(H₂L)配体构建的配位聚合物: $[\text{NiL}(\text{H}_2\text{O})\cdot\text{H}_2\text{O}]_n$ (**1**), $[\text{CdL}(\text{phen})]_n$ (**2**)。测定了聚合物的晶体结构,研究了聚合物的热稳定性和荧光性能。

1 实验部分

1.1 主要试剂与仪器

5-(4-(2,6-二(2-吡啶基)-4-吡啶基)苯氧基)间苯二甲酸(H₂L),对苯二甲酸(H₂tpa)和菲咯啉(phen)购自济南恒化科技有限公司,使用时未进行纯化。主要仪器:意大利 CARLO ERBA 1106 元素分析仪;美国 NICOLET 公司的 NEXUS 870 傅立叶变换红外光谱仪,样品用 KBr 压片,波段范围为 400~4 000 cm⁻¹;英国 EDINBURGH INSTRUMENTS 公司的 FS920 稳态荧光光谱仪;瑞士 METTLER TOLEDO 的 TGA/SDTA 851e 热重分析仪,采用 N₂ 气氛,温度范围 30~1 000 °C,升温速率 5 °C·min⁻¹;德国 BRUKER Smart APEX II CCD 单晶衍射仪。

1.2 配位聚合物的合成

$[\text{NiL}(\text{H}_2\text{O})\cdot\text{H}_2\text{O}]_n$ (**1**)的合成:将反应物 NiSO₄·

6H₂O (0.10 mmol,0.026 3 g),H₂L (0.05 mmol,0.024 4 g),H₂tpa (0.05 mmol,0.008 3 g),NaOH (0.30 mmol,0.012 g)混合在 13 mL 蒸馏水,2 mL 乙醇和 0.5 mL DMF 的溶液中,接着将反应混合物密封在 25 mL 聚四氟乙烯内衬的不锈钢反应釜内,在 160 °C 晶化 72 h,然后经过 3 d 的缓慢降温冷却至室温,将反应釜内的物质过滤,洗涤,干燥,得到配合物 **1** 的绿色花瓣状晶体,产率 40.6% (基于配体 H₂L)。经元素分析测定,配合物的组成为 C₂₉H₂₁N₃NiO₇,实验值(理论值)(%):C,60.69(59.82);H,3.37(3.64);N,7.28(7.22)。主要红外光谱数据如下 (KBr,cm⁻¹):3 392,2 976,1 597,1 365,1 250,1 047,825,725。

$[\text{CdL}(\text{phen})]_n$ (**2**)的合成:用反应物 Cd(Ac)₂·2H₂O (0.10 mmol,0.026 7 g)代替 NiSO₄·6H₂O,phen(0.05 mmol,0.010 g)代替 H₂tpa,采用 **1** 的合成方法,得到 **2** 的无色透明针状晶体,产率 55.0% (基于配体 H₂L)。经元素分析测定,其组成为 C₄₁H₂₅CdN₅O₅,实验值(理论值)(%):C,63.69(63.13);H,3.14(3.23);N,8.91(8.98)。主要红外光谱数据如下 (KBr,cm⁻¹):3 419,2 461,1 595,1 388,1 250,970,821,719。

1.3 配位聚合物晶体的 X-射线衍射

选择大小为 0.30 mm×0.28 mm×0.17 mm 聚合物 **1** 和 0.29 mm×0.21 mm×0.19 mm 聚合物 **2** 的单晶,在 Bruker Smart APEX II CCD 单晶衍射仪上,用经石墨单色器单色化的 Mo Kα 射线(λ=0.071 073 nm)分别收集晶体的衍射数据。晶体衍射数据使用 Lp 因子校正和经验吸收校正,用 SHELX-97^[7]程序系统进行单晶结构解析。配合物的结构由直接法解出,全部非氢原子的坐标及其各向异性温度因子用全矩阵最小二乘法进行修正。配位聚合物的晶体学数据和结构精修参数列于表 1 中,主要的键长和键角列于表 2。

CCDC:1406238,**1**;1406239,**2**。

表 1 配位聚合物的晶体学参数和结构精修参数

Table 1 Crystal data and structure parameters for complexes **1** and **2**

Complex	1	2
Empirical formula	C ₂₉ H ₂₁ N ₃ NiO ₇	C ₄₁ H ₂₅ CdN ₅ O ₅
Formula weight	582.19	780.07
Crystal system	Orthorhombic	Monoclinic
Space group	<i>Ibca</i>	<i>P2₁/c</i>
<i>a</i> / nm	1.956 4(8)	0.967 92(2)
<i>b</i> / nm	2.350 9(10)	1.621 58(4)

续表 1

<i>c</i> / nm	2.599 8(11)	2.240 74(5)
β / (°)		113.684(1)
<i>V</i> / nm ³	11.957(8)	3.220 8(1)
<i>Z</i>	16	4
<i>D_c</i> / (g·cm ⁻³)	1.294	1.609
μ / mm ⁻¹	0.696	0.736
<i>F</i> (000)	4 800	1 576
$\theta_{\min}$, $\theta_{\max}$ / (°)	3.41, 27.50	1.60, 27.64
Reflections collected	81 608	63 242
Unique reflections (<i>R_{int}</i>)	6 848 (0.140 0)	7 489 (0.045 0)
Data with <i>I</i> >2 σ (<i>I</i>)	3 416	6 365
Parameters refined	371	469
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ (<i>I</i> >2 σ (<i>I</i>))	0.067 7, 0.190 2	0.030 7, 0.692
<i>R</i> ₁ , <i>wR</i> ₂ (all data)	0.146 2, 0.222 3	0.041 1, 0.074 5
Goodness-of-fit (<i>F</i> ²)	1.011	1.025
($\Delta\rho$) _{max} , ($\Delta\rho$) _{min} / (e·nm ⁻³)	1 114, -619	660, -433

表 2 配位聚合物的主要键长(nm)和键角(°)

Table 2 Selected bond lengths (nm) and bond angles (°)

1					
Ni(1)-O(4)#1	0.200 6(3)	Ni(1)-N(3)#2	0.204 9(5)	Ni(1)-O(1W)	0.206 9(4)
Ni(1)-N(2)#3	0.210 5(5)	Ni(1)-O(1)	0.211 5(4)	Ni(1)-O(2)	0.217 0(4)
O(4)#1-Ni(1)-N(3)#2	98.86(16)	O(4)#1-Ni(1)-O(1W)	90.81(14)	N(3)#2-Ni(1)-O(1W)	91.17(17)
O(4)#1-Ni(1)-N(2)#3	91.49(15)	N(3)#2-Ni(1)-N(2)#3	93.31(18)	O(1W)-Ni(1)-N(2)#3	174.59(15)
O(4)#1-Ni(1)-O(1)	161.82(15)	N(3)#2-Ni(1)-O(1)	99.28(15)	O(1W)-Ni(1)-O(1)	87.70(14)
N(2)#3-Ni(1)-O(1)	88.59(15)	O(4)#1-Ni(1)-O(2)	99.92(14)	N(3)#2-Ni(1)-O(2)	161.22(14)
O(1W)-Ni(1)-O(2)	88.72(15)	N(2)#3-Ni(1)-O(2)	86.06(15)	O(1)-Ni(1)-O(2)	61.95(12)
2					
Cd(1)-O(4)#1	0.222 02(19)	Cd(1)-O(2)	0.228 82(17)	Cd(1)-N(3)#2	0.234 51(18)
Cd(1)-N(4)	0.237 49(19)	Cd(1)-N(5)	0.244 90(19)	Cd(1)-O(1)	0.260 71(19)
Cd(1)-O(3)#1	0.281 3(2)				
O(4)#1-Cd(1)-O(2)	103.27(7)	O(4)#1-Cd(1)-N(3)#2	113.55(8)	O(2)-Cd(1)-N(3)#2	110.69(7)
O(4)#1-Cd(1)-N(4)	106.72(7)	O(2)-Cd(1)-N(4)	95.87(7)	N(3)#2-Cd(1)-N(4)	123.68(6)
O(4)#1-Cd(1)-N(5)	83.45(7)	O(2)-Cd(1)-N(5)	164.35(7)	N(3)#2-Cd(1)-N(5)	78.53(7)
N(4)-Cd(1)-N(5)	68.55(6)	O(4)#1-Cd(1)-O(1)	155.77(7)	O(2)-Cd(1)-O(1)	52.53(6)
N(3)#2-Cd(1)-O(1)	80.67(6)	N(4)-Cd(1)-O(1)	77.94(6)	N(5)-Cd(1)-O(1)	119.60(6)
O(4)#1-Cd(1)-O(3)#1	50.15(7)	O(2)-Cd(1)-O(3)#1	78.36(7)	N(3)#2-Cd(1)-O(3)#1	83.14(6)
N(4)-Cd(1)-O(3)#1	152.35(6)	N(5)-Cd(1)-O(3)#1	116.05(6)		

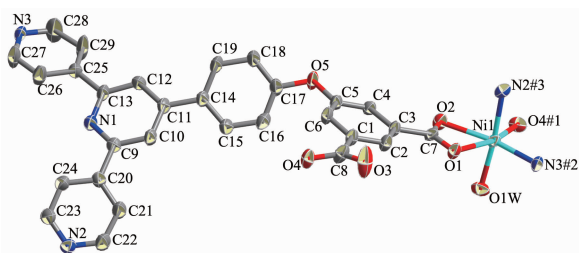
Symmetry codes: #1: *x*+1/2, *y*, -*z*+1/2; #2: *x*+1/2, *y*+1/2, *z*-1/2; #3: -*x*+1, *y*, *z*-1/2 for **1**; #1: *x*+1, *y*, *z*; #2: *x*, *y*-1, *z* for **2**.

2 结果与讨论

2.1 配位聚合物 1 的晶体结构

配合物 **1** 属正交晶系, *Ibca* 空间群, 最小不对

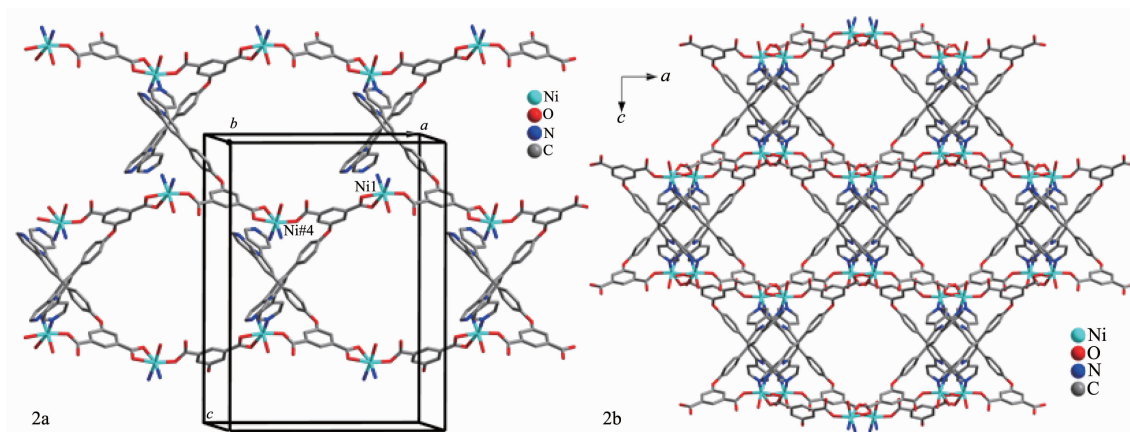
称单元包括 1 个晶体学独立的 Ni(II)离子, 1 个 L²-配体, 1 个配位水分子和 1 个晶格水分子。如图 1 所示, 中心金属 Ni(II)与来自 2 个 L²-配体的 3 个羧基氧原子(Ni-O 0.200 6(3)~0.217 0(4) nm), 1 个水分子



Thermal ellipsoids are shown at the 50% probability level; H atoms are omitted for clarity; Symmetry codes: #1: $x+1/2, y, -z+1/2$; #2: $x+1/2, y+1/2, z-1/2$; #3: $-x+1, y, z-1/2$

图 1 聚合物 **1** 的金属 Ni(II) 原子配位环境图

Fig.1 View of the coordination environment of the center Ni(II) in **1**



Symmetry code: #4: $x-1/2, y, -z+1/2$

图 2 聚合物 **1** 的二维平面结构图和三维网络结构图

Fig.2 Drawing of the 2D and the 3D frameworks in **1**

2.2 配位聚合物 **2** 的晶体结构

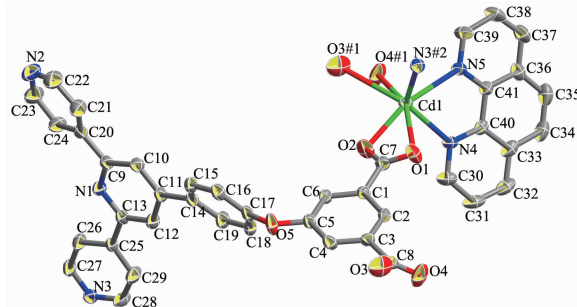
配合物 **2** 属单斜晶系, 空间群为 $P2_1/c$, 最小不对称单元中包括 1 个晶体学独立的 Cd(II) 金属中心, 1 个 L^2 -配体和 1 个 phen 分子。如图 3 所示, Cd(II) 与 2 个 L^2 -配体的 4 个羧基氧原子 (Cd-O 0.220 2(2)~0.281 3(2) nm), 另一个 L^2 -配体的氮原子 (Cd-N 0.234 5(2) nm), 以及 1 个 phen 分子的 2 个氮原子 (Cd-N 0.234 9(2), 0.244 9(2) nm) 配位, 形成七配位的单帽三棱柱几何构型。 L^2 -配体上的 2 个羧基氧原子采用双齿螯合配位模式, 桥连相邻的 2 个 Cd(II) 离子, 形成平行于 a 轴的一维链, 吡啶氮原子与另一条链上的金属配体, 形成平行于 ab 的二维平面。每个 L^2 -配体通过 2 个羧基和 1 个吡啶基与 3 个中心金属 Cd(II) 相连, 每个金属中心连接 3 个 L^2 -配体, 从而形成了 (3,3)-连接的 2D 网络 (如图 4a)。

由于芳香环的存在, 在聚合物 **2** 中存在相邻层的 phen 和 H_2L 配体芳香环间面对面较强的 $\pi \cdots \pi$

(Ni(1)-O(1W) 0.206 9(4) nm) 和来自另外 2 个 L^2 -配体的吡啶氮原子配位 (Ni-N 0.204 9(4), 0.210 5(5) nm), 形成六配位的八面体构型。

如图 2 所示, L^2 -配体的 2 个羧基氧原子桥连相邻的 2 个 Ni(II) 离子, 形成平行于 a 轴的一维链, 2 个吡啶氮原子再分别与不同链的金属离子连接, 最终形成一个三维网络结构。每个金属中心 N(II) 与 4 个 L^2 -配体相连, 可看作一个 4-连接点, 每个 L^2 -配体连接相邻的 4 个金属中心 Ni(II), 因此也可看成是一个 4-连接点, 最终形成了 (4,4)-连接的拓扑网络结构。

堆积的作用。如图 4b 所示: 环(1): C14→C15→C16→C17→C18→C19, 环 (2): C30#4→C31#4→C32#4→C33#4→C40#4→N4#4 (Symmetry code: #4: $2-x, 1/2+y, 1/2-z$), 环(1)和环(2)的质心坐标分别为: 1.258 70,



Thermal ellipsoids are shown at the 50% probability level; H atoms are omitted for clarity; Symmetry codes: #1: $x+1, y, z$; #2: $x, y-1, z$

图 3 聚合物 **2** 的金属原子配位环境图

Fig.3 View of the coordination environment of the center Cd(II) in **2**

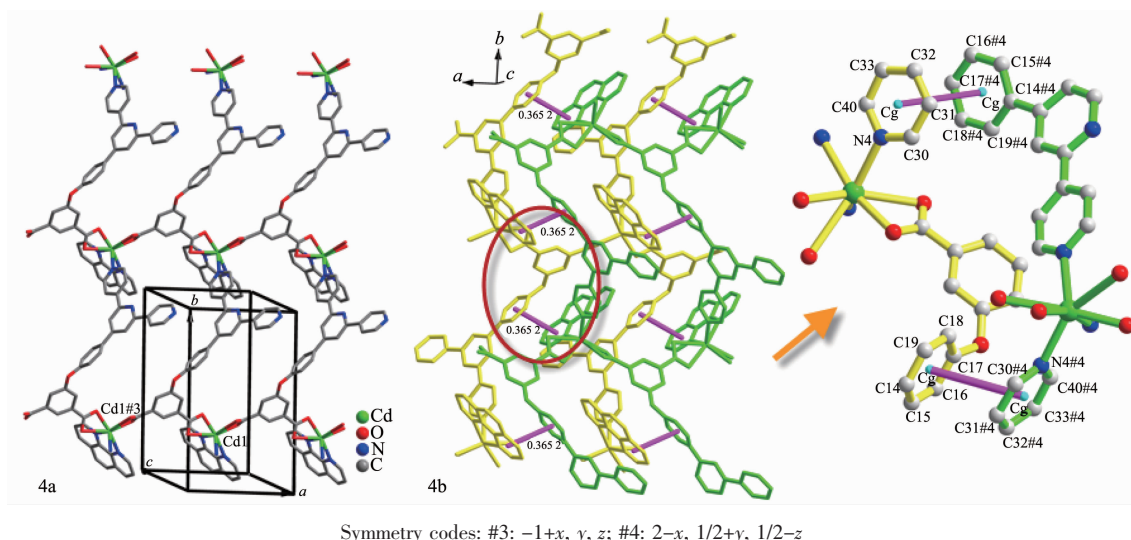


图 4 聚合物 2 的二维层状结构图和 $\pi \cdots \pi$ 堆积作用

Fig.4 Drawing of 2D framework and $\pi \cdots \pi$ interactions between the parallel aromatic rings in 2

$-0.177\ 77, 0.930\ 92; 0.923\ 25, -0.278\ 95, 0.931\ 52$ 。环(1)平面和环(2)平面的面间距、质心距、二面角分别为 $0.341\ 1\ \text{nm}$ 、 $0.365\ 2\ \text{nm}$ 、 6.58° 。在聚合物 2 中, $\pi \cdots \pi$ 堆积作用形成了三维的网络结构使得结构更加稳定从而增强了其热稳定性。

2.4 配位聚合物 2 的荧光性质

研究表明, 具有 d^{10} 电子结构的金属参与构筑的金属-有机配位聚合物往往具有较好的荧光性能, 尤其是由 π 共轭体系的芳香类配体所构筑的 Zn(II)和 Cd(II)配合物能够发射较强的荧光, 可以作为潜在的光学材料^[8]。

在室温下, 我们测定了 2 的固相荧光发射谱, 如图 5 所示。配体 H_2L 在 $404\ \text{nm}$ 波长的光源激发下, 在 $450\sim 650\ \text{nm}$ 范围内有较宽发射峰, 在 $556\ \text{nm}$ 处出现了较强的绿色荧光发射峰; 在 $363\ \text{nm}$ 波

长的光源激发下, 2 在 $435\ \text{nm}$ 处有强的蓝色荧光发射峰。从图中我们可以看出, 相对于配体 H_2L , 2 的荧光强度大为增强, 并且出现了较为显著的蓝移。 d^{10} 金属配合物的荧光增强效应是因为配体和金属离子的配位作用使得配合物刚性增加, 有效减少了能量传递的损失^[9]。蓝移现象的产生可能归因于 L^{2-} 或 phen 配体到金属的电荷转移(LMCT), 电子的转移使配体的共轭效应增强, 并且以非辐射形式损失的能量减少, 荧光光谱强度增大。

2.5 配位聚合物的热稳定性分析

聚合物的热重曲线如图 6 所示。1 在 $30\sim 220\ ^\circ\text{C}$ 温度范围内, 失重 7.02% , 相应失去晶格水分子和配位水分子(理论值为 6.19%)。在 $400\sim 500\ ^\circ\text{C}$ 温度范围内, 聚合物迅速分解, 骨架开始坍塌, 当温度超过 $500\ ^\circ\text{C}$ 时, 配合物失重变得缓慢。2 比较稳定, 只有

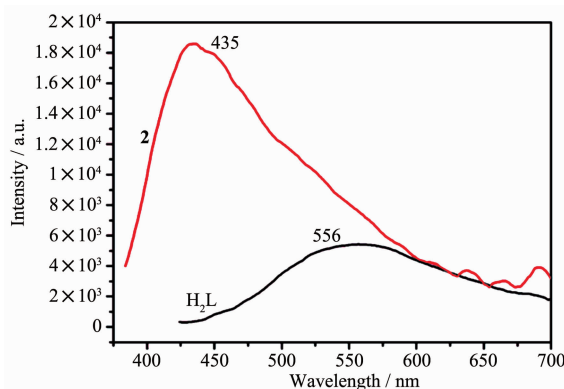


图 5 配体 H_2L 和聚合物 2 的荧光发射谱图

Fig.5 Solid-state emission spectra for H_2L and 2 at room temperature

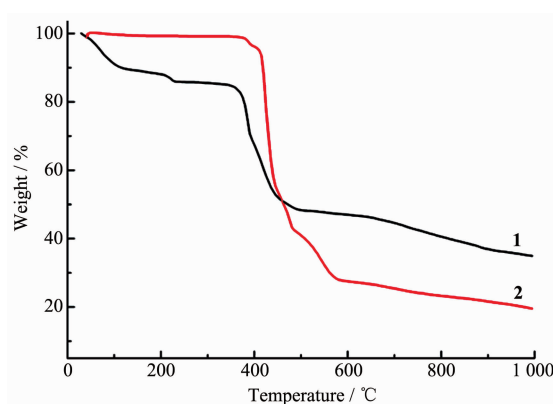


图 6 聚合物 1 和 2 的热重曲线图

Fig.6 Thermal analysis curves for 1 and 2

一步明显的失重过程。在 390 °C 开始分解,在 390~800 °C 温度范围内,配合物总失重 77.22%,可能是由于有机配体的分解,相应失去所有配体(理论值 78.58%)。最后稳定在原来质量的 22.78% 处,残留物可能是 CdO(理论值 21.42%)。

参考文献:

- [1] (a)Moulton B, Zaworotko M J. *Chem. Rev.*, **2001**,**101**:1629-1658
(b)Lin Z J, Lu J, Hong M C, et al. *Chem. Soc. Rev.*, **2014**,**43**:5867-5895
(c)Jiang H L, Makal T A, Zhou H C. *Coord. Chem. Rev.*, **2013**,**257**:2232-2249
(d)Chen Q H, Jiang F L, Yuan D Q, et al. *Chem. Sci.*, **2014**,**5**:483-488
- [2] (a)Sumida K, Rogow D L, Mason J A, et al. *Chem. Rev.*, **2012**,**112**(2):724-781
(b)Chaemchuen S, Kabir N A, Zhou K, et al. *Chem. Soc. Rev.*, **2013**,**42**(24):9304-9332
(c)Li J R, Yu J M, Lu W G, et al. *Nat. Commun.*, **2013**,**4**:1538
- [3] (a)Lee J Y, Farha O K, Roberts J, et al. *Chem. Soc. Rev.*, **2009**,**38**:1450-1459
(b)Liu Y, Xuan W M, Cui Y. *Adv. Mater.*, **2010**,**22**:4112-4135
(c)Yoon M, Srirambalaji R, Kimoom K. *Chem. Rev.*, **2011**,**112**:1196-1231
(d)Dhakshinamoorthy A, Garcia H. *Chem. Soc. Rev.*, **2012**,**41**:5262-5284
(e)Moon H R, Lim D W, Suh M P. *Chem. Soc. Rev.*, **2013**,**42**:1807-1824
- [4] (a)Zhu Q L, Shen C J, Tan C H, Sheng T L, et al. *Chem. Commun.*, **2012**,**48**:531-533
(b)Heine J, Muller-Buschbaum K. *Chem. Soc. Rev.*, **2013**,**42**:232-9242
(c)Jiang H L, Feng D W, Wang K C, et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**,**135**(37):13934-13938
- [5] (a)Miyasaka H. *Acc. Chem. Res.*, **2013**,**46**(2):248-257
(b)Sun J K, Wang P, Yao Q X, et al. *J. Mater. Chem.*, **2012**,**22**:12212-12219
(c)Wang M S, Yang C, Wang G E, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2012**,**51**:3432-3435
(d)Zhang W, Xiong R G. *Chem. Rev.*, **2012**,**112**:1163-1195
(e)Coronadoand E, Espallargas G. *Chem. Soc. Rev.*, **2013**,**42**:1525-1539
- [6] (a)Cao K L, Zhang Y P, Cai N Y, et al. *J. Solid State Chem.*, **2014**,**215**:34-42
(b)HAN Min-Min(韩敏敏), CHEN Xiao(陈晓),ZHANG Yi-Ping(张依萍), et al. *Chinese J. Inorg. Chem.*(无机化学学报), **2014**,**30**:1653-1659
(c)Cao K L, Xia Y, Wang G X, et al. *Inorg. Chem. Commun.*, **2015**,**53**:42-45
- [7] (a)Sheldrick G M. *SHELXS-97, Program for X-ray Crystal Structure Solution and Refinement*, University of Göttingen, Göttingen, Germany, **1997**.
(b)Sheldrick G M. *SHELXTL-97, Program for the Refinement of Crystal Structures*, University of Göttingen, Göttingen, Germany, **1997**.
- [8] (a)Tao J, Tong M L, Shi J X, et al. *Chem. Commun.*, **2000**:2043-2044
(b)Xia Y, Cao K L, Han M M, et al. *Inorg. Chem. Commun.*, **2015**,**56**:76-78
- [9] Xu C Y, Li L K, Wang Y P, et al. *Cryst. Growth Des.*, **2011**,**11**:4667-4675