



## همنهشت، ساختار بلوری و آنالیز سطح هیرشفلد نمک اسیدی [۴-متیل فنیل آمونیوم] [4-CH<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NH<sub>3</sub>][(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>O)P(O)(O)(OH)]، [O-فنیل(هیدروکسیل)فسفات]

فاطمه کریمی احمدآباد<sup>۱</sup>، مهرداد پورایوبی<sup>۱\*</sup>، مارک نکاس<sup>۲</sup>

۱- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد

2- CEITEC – Central European Institute of Technology, Masaryk University, Kamenice 5, Brno, CZ-62500 Czech, Republic,

3- Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlarska 2, Brno, CZ-61137, Czech Republic

(دریافت مقاله: ۹۵/۳/۲، نسخه نهایی: ۹۵/۶/۸)

**چکیده:** همنهشت (سنتز) و آنالیز با پراش پرتو X نمک اسیدی [۴-متیل فنیل آمونیوم][O-فنیل(هیدروکسیل)فسفات]، [4-CH<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NH<sub>3</sub>][(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>O)P(O)(O)(OH)]، گزارش شده‌اند. این ترکیب در سیستم بلوری تک‌میل، گروه فضایی P2<sub>1</sub>/c (a = ۹,۵۱۴۷(۴) Å, b = ۲۳,۲۱۵۸(۱۰) Å, c = ۱۳,۲۷۴۰(۶) Å و β = ۱۱۱,۲۴۴(۴)°) و با چهار جزء مستقل شامل دو کاتیون و دو آنیون در واحد بی تقارن تبلور یافته است. در ساختار بلوری، اجزای مجاور به صورت پیوندهای هیدروژنی O-H...O و N-H...O به یکدیگر متصل شده، و آرایش نردبانی موازی با محور [۱۰۰] را ایجاد کرده‌اند. آنالیز سطح هیرشفلد و نمودار دو بعدی اثر انگشتی برای بررسی برهم‌کنش‌های موجود در ساختار مورد استفاده قرار گرفت. برهم‌کنش‌های O-H...O و N-H...O (نواحی سرخ در سطح هیرشفلد) برهم‌کنش‌های شاخص بوده و در نمودارهای رد انگشتی دو آنیون مستقل، دو شاخک شاخص به برهم-کنش O...H(O) و نیز در نمودار مربوط به دو کاتیون مستقل، تک شاخک شاخص به برهم‌کنش O...H(N) تخصیص داده شد.

**واژه‌های کلیدی:** نمک اسیدی [۴-متیل فنیل آمونیوم][O-فنیل(هیدروکسیل)فسفات]؛ آنالیز پراش پرتو X؛ پیوند هیدروژنی؛ آنالیز سطح هیرشفلد.

### مقدمه

استرهای فسفر دسته‌ای از ترکیبات معدنی فسفر دارند که به میزان زیادی در محیط‌های زیستی یافت می‌شوند [۸، ۹]. برخی از ترکیبات این خانواده به دلیل کاربردهای زیستی و صنعتی مورد توجه قرار گرفته‌اند. به‌عنوان مثال ترکیبات استری فسفر حاصل از واکنش‌های سنتزی به عنوان ترکیبات ضد آتش، افزودنی‌های نفت خام، افزودنی‌های غذایی، علف-کش‌ها و مواد دارویی به کار برده شده‌اند [۱۰-۱۴].

سطوح هیرشفلد و نمودار اثر انگشتی از روش‌های آنالیز تصویری برای بررسی برهم‌کنش‌های بین مولکولی و درک و تعامل بین مولکولی هستند [۱۵]. در سال‌های اخیر این روش در بررسی برهم‌کنش‌های موجود در ساختارهای بلوری استفاده شده است [۱۶-۱۸]. در همین راستا در این مقاله ترکیب

مشتملات ترکیبات فسفات دارای ساختمان کلی XYP(O)O<sup>-</sup> هستند که در آن X, Y: O<sup>-</sup>, OH, OR, OAr, NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>, ... مورد نظر است. این ترکیبات هم الکترون با یون PO<sub>4</sub><sup>3-</sup> (یون فسفات) هستند. ترکیبات فسفات لیگندهای اکسیژن دهنده خوبی هستند و از اهمیت ویژه‌ای در زمینه شیمی هم‌ارایی، شیمی ابر مولکول، علم مهندسی بلور و بررسی برهم‌کنش‌های بین مولکولی برخوردارند [۲۰، ۲۱]. روی این ترکیبات و ساختار بلوری آنها پژوهش‌هایی در سال‌های اخیر انجام گرفته است [۳-۵] (که به ترکیباتی مانند دی اکسوفسفات [C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>NH<sub>3</sub>][(F<sub>3</sub>C<sub>2</sub>ONH)(C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>NH)PO<sub>2</sub>]) [۶] و دی کلروفسفات (C<sub>10</sub>H<sub>20</sub>NH<sub>2</sub>)PO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> [۷] اشاره می‌شود).

\*نویسنده مسئول، تلفن: ۰۵۱۳۸۸۰۵۵۳۵، نمابر: ۰۵۱۳۸۷۹۶۴۱۶، پست الکترونیکی: pourayoubi@um.ac.ir

یک قطعه نشان داد. شکل ۱ ساختار شیمیایی ترکیب را نمایش می دهد، (نقطه ذوب:  $143^{\circ}\text{C}$ ).

### بحث و نتیجه گیری

#### بررسی داده های بلورنگاری

[۴-متیل فنیل آمونیوم][*O*-فنیل(هیدروکسیل)فسفات] در سیستم بلوری تک میل، گروه فضایی  $P2_1/c$  ( $a = 9,5147(4) \text{ \AA}$ )،  $b = 23,2158(10) \text{ \AA}$ ،  $c = 13,2740(6) \text{ \AA}$  و  $\beta = 111,244(4)^{\circ}$  و با چهار جزء مستقل شامل دو کاتیون و دو آنیون در سلول واحد تبلور یافته است. شمای این ترکیب در شکل ۱ و ساختار آن در شکل ۲ نشان داده شده است و داده های بلوری، برخی از طول و زوایای پیوندی و پیوندهای هیدروژنی به ترتیب در جدول های ۱ تا ۳ آورده شده اند.

واحد بی تقارن این ترکیب شامل دو کاتیون و دو آنیون است. طول پیوند فسفر-اکسیژن در قطعه  $[\text{P}(\text{O})(\text{O})]^{-}$  در این دو آنیون، به ترتیب برای  $\text{P}(1)-\text{O}(6)$  برابر با  $1,4940(10) \text{ \AA}$  و  $\text{P}(1)-\text{O}(7)$  برابر با  $1,4999(10) \text{ \AA}$  و  $\text{P}(2)-\text{O}(2)$  برابر با  $1,4988(10) \text{ \AA}$ ،  $\text{P}(2)-\text{O}(3)$  برابر با  $1,4895(10) \text{ \AA}$  است که به دلیل تشدید، از طول پیوند  $\text{P}=\text{O}$  نرمال بلندتر است [۲۱]. در هر دو آنیون، چهار اتم اکسیژن به اتم فسفر متصل است و طول پیوند فسفر-اکسیژن مربوط به بخش *O*-فنیلی، در دو آنیون تقریباً برابر ( $1,6016(11) \text{ \AA}$ ) و  $1,6017(11) \text{ \AA}$  بوده و طول پیوند فسفر-اکسیژن مربوط به بخش هیدروکسیلی این ترکیب در این دو آنیون به ترتیب برای  $\text{P}(1)-\text{O}(8)$  و  $\text{P}(2)-\text{O}(4)$  برابر با  $1,5521(11) \text{ \AA}$  و  $1,5492(11) \text{ \AA}$  است. اتم فسفر دارای پیکربندی چهاروجهی منحرف است و زاویه های پیرامون اتم  $\text{P}(1)$  در بازه  $104,75(6)^{\circ}$  تا  $114,91(6)^{\circ}$  و پیرامون اتم  $\text{P}(2)$  در بازه  $104,08(6)^{\circ}$  تا  $116,00(6)^{\circ}$  است.

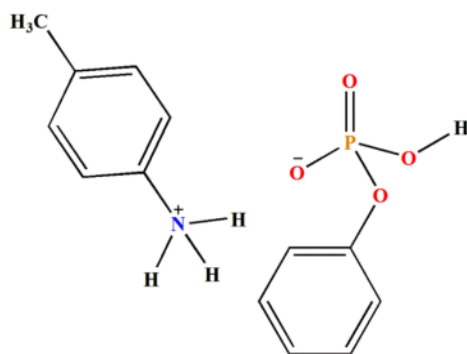
جدید [۴-متیل فنیل آمونیوم][*O*-فنیل (هیدروکسیل) فسفات] سنتز و ساختار بلوری آن به روش پراش پرتو  $X$  روی تک بلور و برهم کنش های بین مولکولی آن با استفاده از آنالیز سطوح هیرشفلد و نمودار اثر انگشتی مورد بررسی قرار گرفته است.

#### بخش تجربی

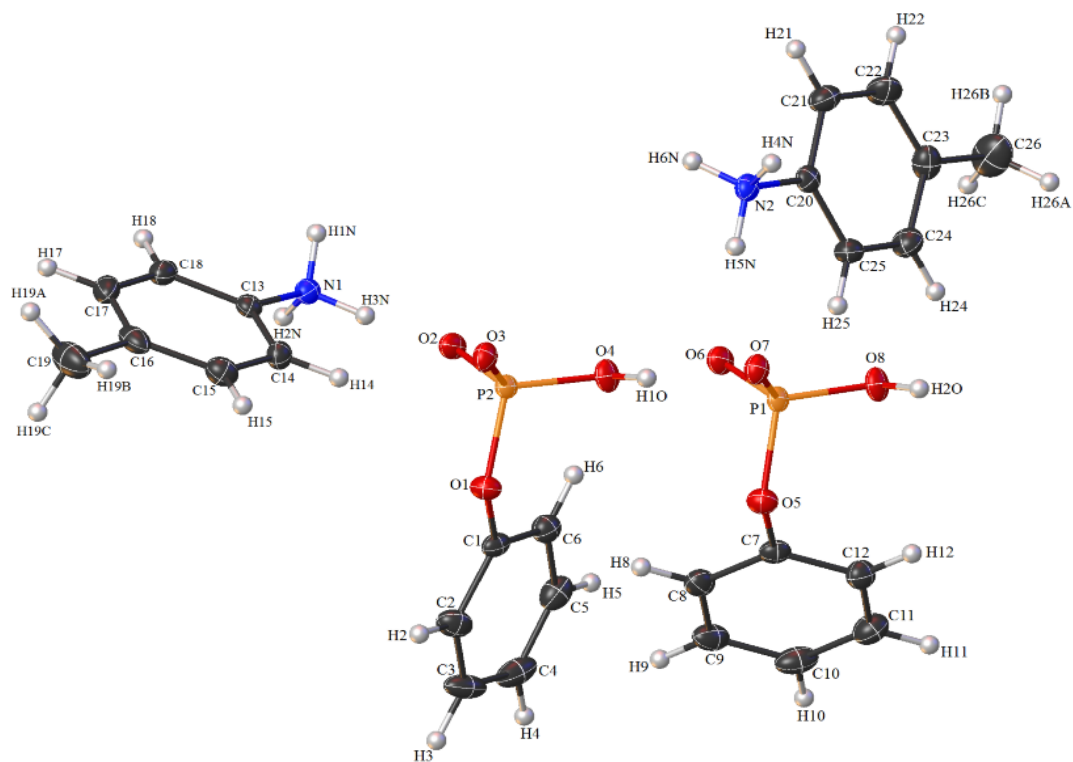
کلیه مواد مورد استفاده در این پژوهش با خلوص تجزیه ای بالا از شرکت های مرک و فلوکا خریداری شده و مورد استفاده قرار گرفتند. ساختار بلوری با پراش سنج پرتو  $X$  مدل Xcalibur Sapphire2, large Be window (تابش  $\text{Mo-K}\alpha$ )، طول موج  $0,71073 \text{ \AA}$  و دمای  $120 \text{ K}$  تعیین شد. ساختار با استفاده از برنامه ی SHELXTL [۱۹] حل و اصلاح شد.

#### روش تهیه [۴-متیل فنیل آمونیوم][*O*-فنیل (هیدروکسیل) فسفات]

در مرحله ی اول از واکنش پیش ماده تجاری  $(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{POCl}_2$  با آمین  $4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{NH}_2$  (با نسبت مولی ۱ به ۲ در حلال کلروفرم خشک) به روش همنهشتی مقاله رجوع [۲۰] و واکنشگر تک کلره  $(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{P}(\text{O})(\text{NHC}_6\text{H}_4\text{-4-CH}_3)\text{Cl}$  سنتز شد. در مرحله ی بعد برای همنهشتی ترکیب اسیدی [۴-متیل فنیل آمونیوم][*O*-فنیل(هیدروکسیل)فسفات]،  $0,94$  گرم معادل  $3,33$  میلی مول از این واکنشگر تک کلره در حلال استون حل شده و با  $3,33$  میلی مول آب یون زدایی شده با توجه به نسبت مولی (۱:۱) در دمای محیط وارد واکنش شد. پس از گذشت دو ساعت از زمان شروع واکنش، محلول در دمای اتاق و در جای ثابتی قرار داده شد تا عمل تبلور صورت گیرد. پس از گذشت چند روز بلورهای زرد رنگی تشکیل شدند. بلورها را جدا کرده و مورد شناسایی و بررسی قرار دادیم که هیدرولیز شدن بیش از



شکل ۱ ساختار شیمیایی [۴-متیل فنیل آمونیوم][*O*-فنیل(هیدروکسیل)فسفات].



شکل ۲ نمایی از ساختار  $[4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{NH}_3][(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{P}(\text{O})(\text{O})(\text{OH})]$  به صورت بیضوی‌های گرمایی (بیضوی‌ها با احتمال ۵۰٪ رسم شده‌اند).

جدول ۱ داده‌های بلوری ترکیب  $[4\text{-CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{NH}_3][(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{P}(\text{O})(\text{O})(\text{OH})]$

$\text{C}_{13}\text{H}_{16}\text{NO}_4\text{P}$	فرمول
۲۸۱٫۲۴	جرم فرمولی (گرم بر مول)
$۰٫۵۵ \times ۰٫۵۵ \times ۰٫۳۵$	اندازه بلور (میلی متر مکعب)
تک میل	سیستم بلوری
$P2_1c$	گروه فضایی
۹٫۵۱۴۷(۴)	$a(\text{Å})$
۲۳٫۲۱۵۸(۱۰)	$b(\text{Å})$
۱۳٫۲۷۴۰(۶)	$c(\text{Å})$
۱۱۱٫۲۴۴(۴)	$\beta(^{\circ})$
۲۷۳۲٫۹(۲)	حجم یاخته واحد ( $\text{Å}^3$ )
۸	تعداد مولکول در یاخته واحد
۱٫۳۶۷	چگالی (گرم بر سانتی متر مکعب)
۱۲۰	دما (کلوین)
$-11 \leq h \leq 5, -15 \leq k \leq 27, -14 \leq l \leq 15$	مقادیر $h, k, l$
۰٫۰۳۲۶	$R_1$
۰٫۰۹۵	$WR_2$
۰٫۰۲۳۶	$R_{\text{int}}$
۳۶۹	تعداد پارامترها
۱۱۷۸۹	تعداد بازتاب‌های کل
۳٫۱۰ تا ۲۴٫۹۹	گستره $\theta(^{\circ})$ جمع آوری شده
۰٫۲۱	$\mu(\text{mm}^{-1})$
۰٫۲۴	$\Delta\rho_{\text{max}}(\text{e}\text{Å}^{-3})$
-۰٫۴۶	$\Delta\rho_{\text{min}}(\text{e}\text{Å}^{-3})$

جدول ۲ طول پیوندها (Å) و زوایای پیوندی (°) مهم در ترکیب  $[4\text{-CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{NH}_3][(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{P}(\text{O})(\text{O})(\text{OH})]$ 

طول پیوند (Å)			
O1-P2	۱,۶۰۱۶(۱۱)	O5-P1	۱,۶۰۱۷(۱۱)
O2-P2	۱,۴۹۸۸(۱۰)	O6-P1	۱,۴۹۹۹(۱۰)
O3-P2	۱,۴۸۹۵(۱۰)	O7-P1	۱,۴۹۴۰(۱۰)
O4-P2	۱,۵۵۲۱(۱۱)	O8-P1	۱,۵۴۹۲(۱۱)
زاویه پیوند (°)			
O7-P1-O6	۱۱۴,۹۱(۶)	O3-P2-O2	۱۱۶,۰۰(۶)
O7-P1-O8	۱۱۴,۰۰(۶)	O3-P2-O4	۱۱۳,۳۶(۶)
O6-P1-O8	۱۰۶,۷۰(۶)	O2-P2-O4	۱۰۶,۹۴(۶)
O7-P1-O5	۱۰۴,۷۵(۶)	O3-P2-O1	۱۰۴,۰۸(۶)
O6-P1-O5	۱۰۹,۳۹(۶)	O2-P2-O1	۱۰۸,۹۷(۶)
O8-P1-O5	۱۰۶,۷۷(۶)	O4-P2-O1	۱۰۷,۰۸(۶)

جدول ۳ داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیب  $[4\text{-CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{NH}_3][(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{P}(\text{O})(\text{O})(\text{OH})]$  (Å و °)

D-H...A	D-H	H...A	D...A	D-H...A
N1-H1N...O2 <sup>i</sup>	۰,۹۴۸(۱۸)	۱,۸۰۰(۱۸)	۲,۷۴۷۵(۱۸)	۱۷۸,۵(۱۵)
N1-H2N...O7 <sup>ii</sup>	۰,۹۱۶(۱۷)	۱,۸۶۳(۱۷)	۲,۷۶۳۶(۱۶)	۱۶۷,۰(۱۵)
N1-H3N...O3	۰,۹۴۰(۱۷)	۱,۹۰۱(۱۷)	۲,۸۳۹۱(۱۷)	۱۷۵,۵(۱۵)
N2-H4N...O3 <sup>iii</sup>	۰,۸۹۸(۱۷)	۱,۸۶۹(۱۷)	۲,۷۵۱۶(۱۶)	۱۶۷,۲(۱۵)
N2-H5N...O6	۰,۹۵۴(۱۸)	۱,۸۵۱(۱۸)	۲,۸۰۳۱(۱۸)	۱۷۶,۳(۱۴)
N2-H6N...O7 <sup>iii</sup>	۰,۹۲۸(۱۷)	۱,۹۳۰(۱۷)	۲,۸۵۵۶(۱۷)	۱۷۵,۳(۱۵)
N2-H6N...O6 <sup>iii</sup>	۰,۹۲۸(۱۷)	۲,۵۹۰(۱۵)	۳,۰۵۲۵(۱۷)	۱۱۱,۳(۱۱)
O4-H1O...O6	۰,۸۶۵(۱۷)	۱,۶۵۹(۱۷)	۲,۵۱۲۳(۱۳)	۱۶۸,۳(۱۷)
O8-H2O...O2 <sup>iv</sup>	۰,۸۸۸(۱۷)	۱,۶۷۵(۱۷)	۲,۵۳۱۳(۱۴)	۱۶۰,۹(۱۷)

(i)  $-x, -y+1, -z+1$ ; (ii)  $x-1, y, z$ ; (iii)  $-x+1, -y+1, -z+1$ ; (iv)  $x+1, y, z$ .

### بررسی سطح هیرشفلد و نمودار دوبعدی اثر انگشتی

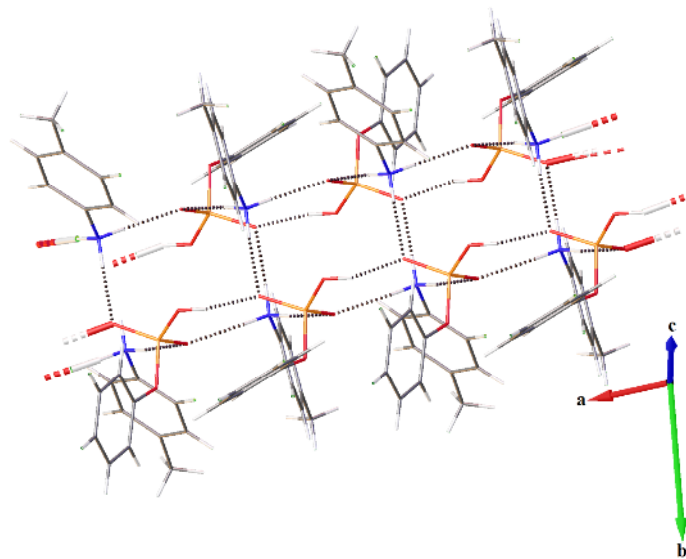
چنانکه گفته شد، سطوح هیرشفلد و نمودار اثر انگشتی از روش‌های آنالیز تصویری برهم‌کنش‌های بین مولکولی است [۱۵]. در این بخش آنالیز سطح هیرشفلد و نمودار دوبعدی اثر انگشتی برای بررسی برهم‌کنش‌های بین مولکولی در  $[4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{NH}_3][(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{P}(\text{O})(\text{O})(\text{OH})]$  با استفاده از نرم افزار Crystal Explorer نسخه ۳٫۱ استفاده شد (شکل-های ۴ تا ۶).

برهم‌کنش‌های  $(\text{N})\text{H}\dots\text{O}$  و  $(\text{O})\text{H}\dots\text{O}$  در سطح هیرشفلد (نواحی سرخ) و برهم‌کنش‌های  $(\text{N})\text{H}\dots\text{O}$  در سطح هیرشفلد (نواحی سرخ) کاتیون شناسایی شد که در شکل ۴ برای یکی از آنیون‌ها و یکی از کاتیون‌ها نشان داده شد. در نمودار اثر انگشتی دو شاخک شاخص به برهم‌کنش  $\text{O}\dots\text{H}(\text{O}) = ۲,۵۱۲۳(۱۳)\text{Å}$  و  $\text{O4}\dots\text{O6}$

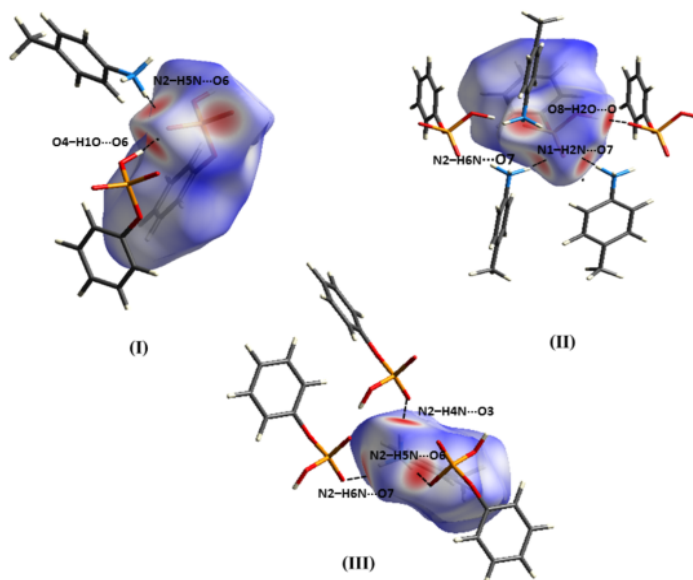
چنانکه در شکل ۳ آورده شده است، در ساختار بلوری این ترکیب، کاتیون‌ها و آنیون‌ها از طریق پیوندهای هیدروژنی، ساختار نردبانی یک بعدی را در امتداد محور  $a$  ایجاد می‌کنند. اکسیژن‌های دو قطعه‌ای  $[\text{P}(\text{O})(\text{O})]$  در این ساختار بلوری به عنوان پذیرنده پیوند هیدروژنی عمل می‌کنند و جالب است که یکی از این اکسیژن‌ها به عنوان پذیرنده‌ی سه پیوند هیدروژنی و باقی اکسیژن‌ها به عنوان پذیرنده‌ی دو پیوند هیدروژنی عمل می‌کنند. دو پیوند هیدروژنی  $\text{O4-H1O}\dots\text{O6}$  و  $\text{O8-H2O}\dots\text{O2}$  با فاصله  $\text{O}\dots\text{O}$  برابر  $۲,۵۱۲۳(۱۳)\text{Å}$  و  $۲,۵۳۱۳(۱۴)\text{Å}$  جزء پیوندهای هیدروژنی پر قدرت [۲۲] محسوب می‌شود (برای فاصله‌ی  $\text{O}\dots\text{O}$  در پیوندهای هیدروژنی پر قدرت متفاوت به مقاله مرجع ۲۲ مراجعه شود). پیوند هیدروژنی دیگری که بین کاتیون‌ها و آنیون‌های این ترکیب مشاهده می‌شود، پیوند بین اکسیژن‌های قطعه  $[\text{P}(\text{O})(\text{O})]$  با گروه‌های  $\text{N-H}$  ۴-متیل فنیل آمونیوم است.

$C\cdots H$  (/۲۷/۴) :N2 کاتیون  $C\cdots C$  و  $H\cdots H$  (/۰/۹)،  
 $O\cdots H$  (/۲۰/۵)  $C\cdots C$  و  $H\cdots H$  (/۵۱/۸)،  
 $O\cdots H$  (/۴۳)،  $C\cdots H$  (/۲۴/۵)  $C\cdots C$  و  $H\cdots H$  (/۳۱/۸)،  
 $O\cdots H$  (/۴۱/۱)  $C\cdots H$  (/۱۹/۴) :P2 و آنیون  
 $C\cdots C$  (/۰/۶) و  $H\cdots H$  (/۳۸/۲).

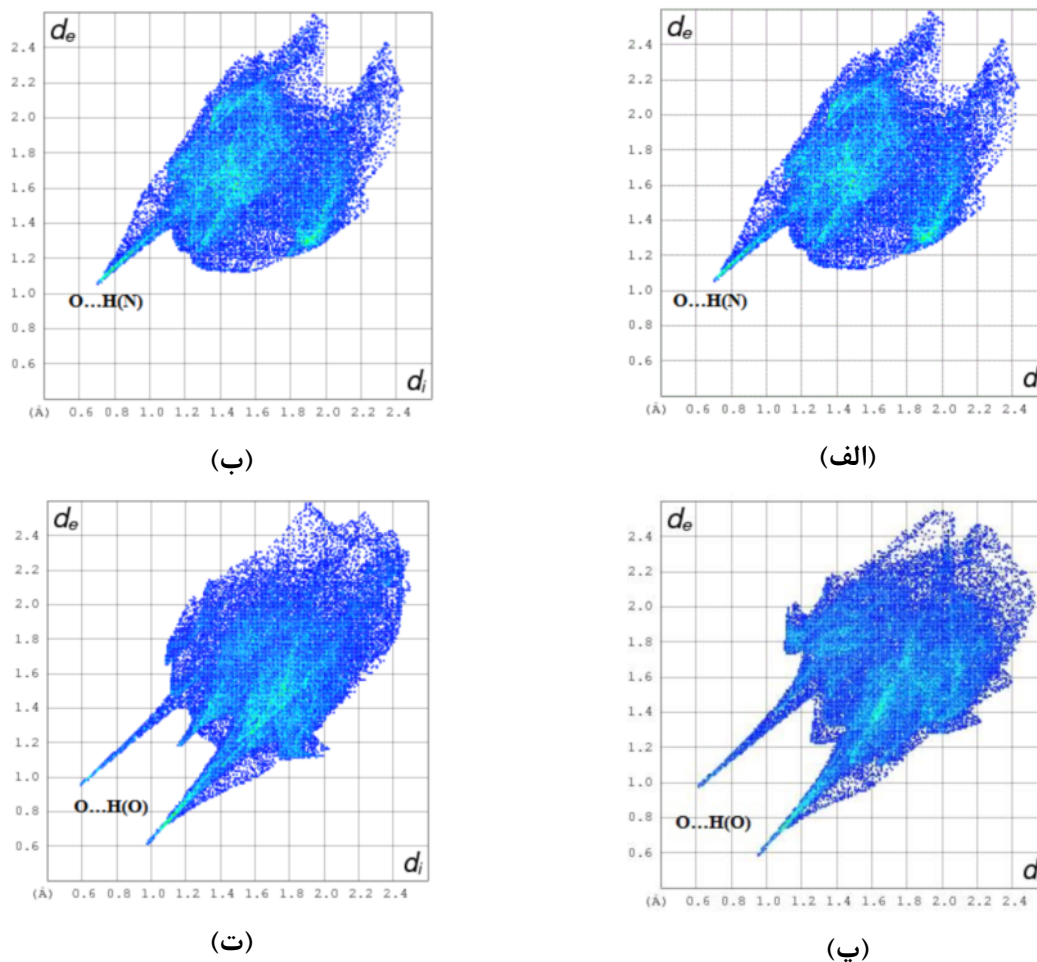
$O8\cdots O2 = ۲,۵۳۱۳(۱۴)$  Å و تک شاخکها به برهم کنش  $O\cdots H(N)$  (در گستره Å  $۲,۷۴۷۵(۱۸)$  تا  $۳,۰۵۲۵(۱۷)$  Å) تخصیص داده شد (شکل ۵). در شکل ۶ درصد توزیع برهم کنشهای متفاوت در چهار واحد کاتیونی و آنیونی نشان داده شد که به صورت زیرند:  
 کاتیون N1:  $C\cdots H$  (/۳۰/۳)،  $O\cdots H$  (/۲۱/۴)،  $C\cdots C$  (/۴۷/۳)



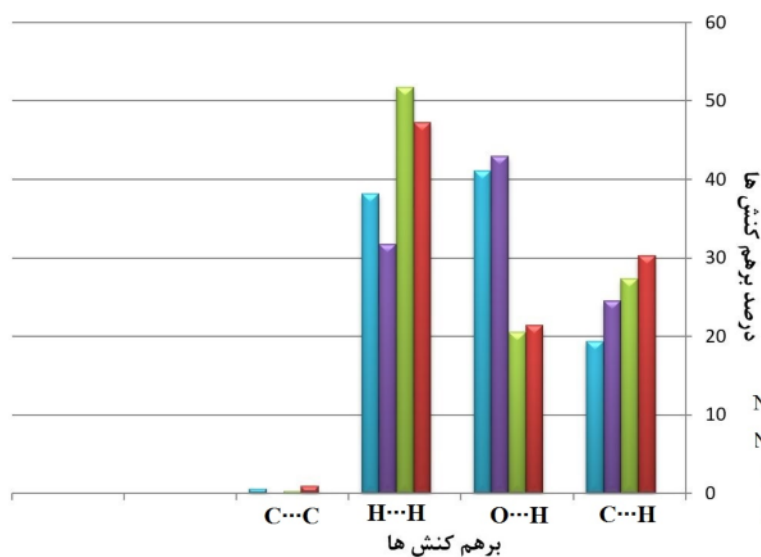
شکل ۳ شمایی از الگوی پیوند هیدروژنی در ترکیب  $[4-CH_3-C_6H_4NH_3][(C_6H_5O)P(O)(O)(OH)]$



شکل ۴ سطوح هیرشفلد و برهم کنشهای هیدروژنی در نمای پشت و جلو برای قطعه آنیونی  $[(C_6H_5O)P(O)(O)(OH)]$  (P1) (I و II) و قطعه کاتیونی  $[4-CH_3-C_6H_4NH_3]^+$  (N1) (III) (شکلها برای آنیون شامل اتم P1 و کاتیون شامل اتم N1 ترسیم شده است و برای آنیون مستقل و کاتیون مستقل دیگر سطوح مشابهی به دست می آید).



شکل ۵ نمودارهای دو بعدی اثر انگشتی در الف و ب: کاتیون‌های N1 و N2. پ و ت: آنیون‌های P1 و P2.



شکل ۶ درصد توزیع برهم کنش‌های مختلف موجود در واحد بی تقارن ترکیب  $[4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{NH}_3][(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{P}(\text{O})(\text{O})(\text{OH})]$  با توجه به سطوح هیرشفلد.

## برداشت

اطلاعات کامل بلور در مرکز بلورنگاری کمبریج (CCDC) با عدد ۱۴۸۰۱۶۵ به ثبت رسیده است و از طریق آدرس [www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html](http://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html) قابل دریافت است.

## قدردانی

با نهایت سپاس و قدردانی از دانشگاه فردوسی مشهد به خاطر حمایت‌های پژوهشی از طرح شماره ۳/۴۱۹۲۷.

## مراجع

- Zeitschrift für Kristallographie-New Crystal Structures 219 (2004) 314–316.
- [8] Hunter T., "Protein kinases and phosphatases", Cell 80 (1995) 225–236.
- [9] Kumara Swamy C. K., Satish Kumar N., "New features in pentacoordinate phosphorus chemistry", Accounts of Chemical Research 39 (2006) 324–333.
- [10] Mallender W., Szegetes T., Rosenberry T., "Acetylthiocholine binds to Asp74 at the peripheral site of human acetylcholinesterase as the first step in the catalytic pathway", Biochemistry 39 (2000) 7753–7763.
- [11] Baldwin A., Huang Z., Jounaidi Y., Waxman D., "Identification of novel enzyme-prodrug combinations for use in cytochrome P450-based gene therapy for cancer", Archives of Biochemistry and Biophysics 409 (2003) 197–206.
- [12] Pang Y., Kollmeyer T., Hong F., Lee J., Hammond P., Haugabouk S., Brimijoin S., "Rational design of alkylene-linked bis-pyridiniumaldoximes as improved acetylcholinesterase reactivators", Chemistry & Biology 10 (2003) 491–502.
- [13] Zhou S., Lin K., Yang H., Li L., Liu W., Li J., "Stereoisomeric separation and toxicity of a new organophosphorus insecticide chloramidophos", Chemical Research in Toxicology 20 (2007) 400–405.
- [14] Nguyen C., Kim J., "Thermal stabilities and flame retardancies of nitrogen-phosphorus flame retardants based on bisphosphoramidates" Polymer Degradation and Stability 93 (2008) 1037–1043.
- [15] Wolff S. K., Grimwood D. J., McKinnon J. J., Jayatilaka D., Spackman M. A., "Crystal Explorer 3.1" University of Western Australia, Perth, 2007.
- [16] Madan Kumar S., Manjunath B. C., Lingaraju G. S., Abdoh M. M. M., Sadashiva M. P., Lokanath N. K., "A Hirshfeld surface analysis and crystal structure of 2'-[1-(2-fluoro-phenyl)-1H-tetrazol-5-Yl]-4-methoxy-biphenyl-2-carbaldehyde", Crystal structure theory and applications 2 (2013) 124–131.
- [17] Pourayoubi M., Saneei A., Dušek M., Alemi Rostami S., Crochet A., Kučeraková M., "Two new organotin (IV)-phosphoryl complexes: crystal structure and Hirshfeld surface analysis", Journal of Crystallography 2007 (2007) 1–10.
- [1] Šlepokura K., Lis T., "Structure of dihydroxyacetone phosphate dimethyl acetal, a stable dihydroxyacetone phosphate precursor, in the crystalline state", Carbohydrate Research 341 (2006) 507–524.
- [2] Wisser B., Janiak C., "5,5'-Diamino-2,2'-bipyridin-1,1'-diium bis(5,5'-diamino-2,2'-bipyridin-1-ium) tetrakis(rac-1,1'-binaphthalene-2,2'-diylphosphate) hexahydrate: a two-dimensional supramolecular hydrogen-bonded network", Acta Crystallographica E63 (2007) o2871–o2872.
- [3] Pourayoubi M., Sabbaghi F., "N-Benzyl-2-propanaminium O-methyltrichloroacetamidophosphate", Acta Crystallographica E63 (2007) p. o4366.
- [4] Yazdanbakhsh M., Sabbaghi F., "N-Benzylpropan-2-aminium (benzylisopropylamido)(2,2,2-trifluoroacetamido)-phosphate", Acta Crystallographica E63 (2007) p. o4318.
- [5] Gholivand K., Zare K., Afshar F., Shariatinia Z., Khavasi H. R., "4-Carbamoylpyridinium dihydrogen phosphate", Acta Crystallographica E63 (2007) p. 4027.
- [6] Gholivand K., Pourayoubi M., Shariatinia Z., Molani S., "Crystal structure of tert-butylammonium trifluoroacetyl-N-(tert-butylamino) dioxophosphate acetonitrile solvate hydrate", Zeitschrift für Kristallographie-New Crystal Structures 220 (2005) 387–389.
- [7] Gholivand K., Pourayoubi M., "Crystal structure of cyclohexyl-tert-butylammonium dichlorophosphate, (C<sub>10</sub>H<sub>20</sub>NH<sub>2</sub>)PCL<sub>2</sub>O<sub>2</sub>", Acta Crystallographica E63 (2007) p. o4318.

Dušek M., "New *rac*- $XP(O)(OC_6H_5)(NHC_6H_4-p-CH_3)$  [ $X = N(CH_3)(cyclo-C_6H_{11})$  and  $NH(C_3H_5)$ ] and *rac*-( $C_6H_5CH_2NH$ ) $P(O)(OC_6H_5)(NH-cyclo-C_6H_{11})$  mixed-amide phosphinates", Acta Crystallographica C69 (2013) 1181–1185.

[21] Corbridge D. E. C. "Phosphorus, an outline of its chemistry, biochemistry and technology", (1995) Elsevier: The Netherlands.

[22] Steiner T., "The hydrogen bond in the solid state", Angewandte chemie international edition. 41 (2002) 48–76.

of the Iranian Chemical Society 12 (2015) 2093–2103.

[18] Alamdar A. H., Pourayoubi M., Saneei A., Dušek M., Kučeráková M., Henriques M. S., "Hirshfeld surface analysis of two new phosphorothioic triamide structures", Acta Crystallographica C71 (2015) 824–833.

[19] Sheldrick G. M., "A short history of SHELX", Acta Crystallographica A64 (2008) 112–122.

[20] Pourayoubi M., Karimi Ahmadabad F., Eshtiagh-Hosseini H., Kučeráková M., Eigner V.,