



همنهشت، ساختار بلوری و آنالیز سطح هیرشفلد نمک اسیدی [۴-متیل فنیل آمونیوم] [4-CH₃-C₆H₄NH₃][(C₆H₅O)P(O)(O)(OH)]، [O-فنیل(هیدروکسیل)فسفات]

فاطمه کریمی احمدآباد^۱، مهرداد پورایوبی^{۱*}، مارک نکاس^{۲و۳}

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-CH₃-C₆H₄NH₃][(C₆H₅O)P(O)(O)(OH)]، گزارش شده‌اند. این ترکیب در سیستم بلوری تک‌میل، گروه فضایی P2₁/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 آرایشی 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

مشتقات ترکیبات فسفات دارای ساختمان کلی XYP(O)O⁻ هستند که در آن X, Y: O⁻, OH, OR, OAr, NR¹R², ... مورد نظر است. این ترکیبات هم الکترون با یون PO₄³⁻ (یون فسفات) هستند. ترکیبات فسفات لیگاند‌های 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 [C₄H₉NH₃][(F₃C₂ONH)(C₄H₉NH)PO₂]) [۶] و دی کلروفسفات (C₁₀H₂₀NH₂)PO₂Cl₂ [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°C).

بحث و نتیجه گیری

بررسی داده های بلورنگاری

[۴-متیل فنیل آمونیوم][*O*-فنیل](هیدروکسیل) فسفات در سیستم بلوری تک میل، گروه فضایی $P2_1/c$ $a = 9.147(4) \text{ \AA}$ ، $b = 23.2158(10) \text{ \AA}$ ، $c = 13.2740(6) \text{ \AA}$ 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 $1.4999(10) \text{ \AA}$ ، $\text{P}(1)-\text{O}(7)$ برابر با $1.4940(10) \text{ \AA}$ 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.

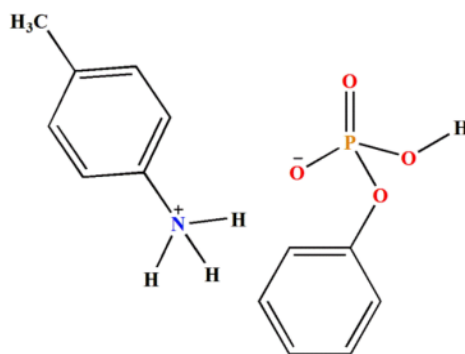
جدید [۴-متیل فنیل آمونیوم][*O*-فنیل] (هیدروکسیل) فسفات [سنتز و ساختار بلوری آن به روش پراش پرتو X روی تک بلور و برهم کنش های بین مولکولی آن با استفاده از آنالیز سطوح هیرشفلد و نمودار اثر انگشتی مورد بررسی قرار گرفته است.

بخش تجربی

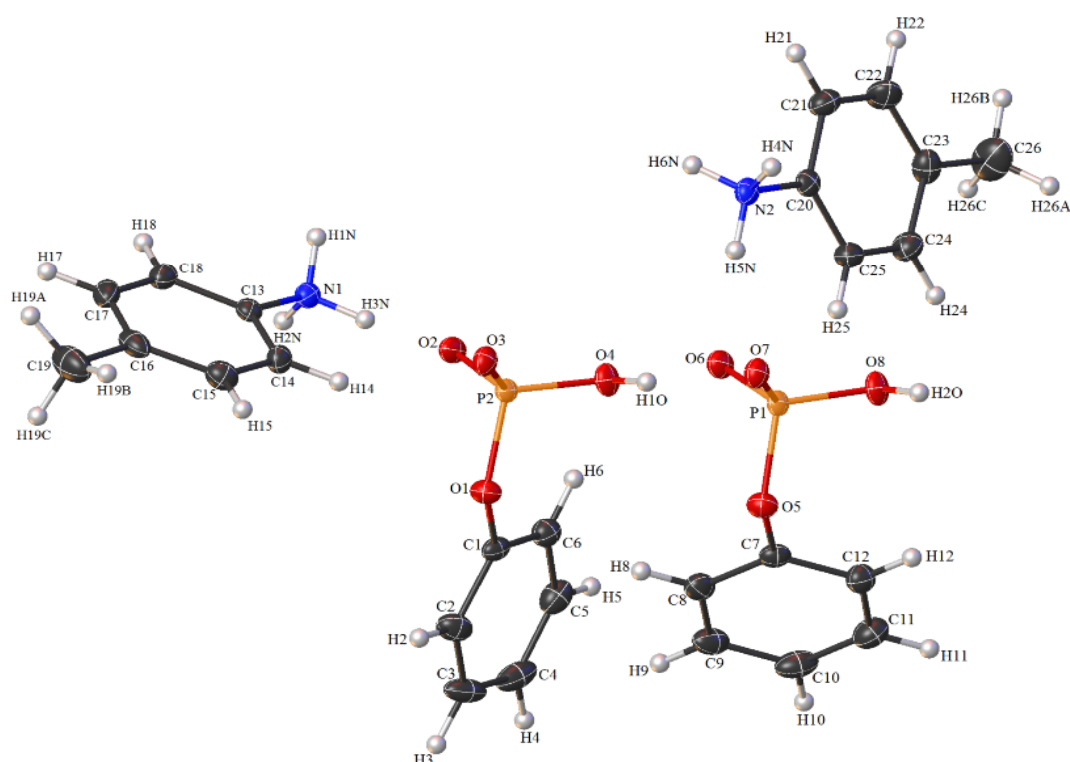
کلیه مواد مورد استفاده در این پژوهش با خلوص تجزیه ای بالا از شرکت های مرک و فلوکا خریداری شده و مورد استفاده قرار گرفتند. ساختار بلوری با پراش سنج پرتو X مدل Xcalibur Sapphire2, large Be window (تابش $\text{Mo-K}\alpha$) طول موج $0.71073 \text{ \AA}$ و دمای 120 K تعیین شد. ساختار با استفاده از برنامه 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 نمایشی 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)	$a(\text{\AA})$
۲۳٫۲۱۵۸(۱۰)	$b(\text{\AA})$
۱۳٫۲۷۴۰(۶)	$c(\text{\AA})$
۱۱۱٫۲۴۴(۴)	$\beta(^{\circ})$
۲۷۳۲٫۹(۲)	حجم یاخته واحد ($\text{\AA}^3$)
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_{int}
۳۶۹	تعداد پارامترها
۱۱۷۸۹	تعداد بازتاب های کل
۳٫۱۰ تا ۲۴٫۹۹	گستره $\theta(^{\circ})$ جمع آوری شده
۰٫۲۱	$\mu(\text{mm}^{-1})$
۰٫۲۴	$\Delta\rho_{\text{max}} (\text{e}\text{\AA}^{-3})$
-۰٫۴۶	$\Delta\rho_{\text{min}} (\text{e}\text{\AA}^{-3})$

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

D-H...A	D-H	H...A	D...A	D-H...A
N1-H1N...O2 ⁱ	۰,۹۴۸(۱۸)	۱,۸۰۰(۱۸)	۲,۷۴۷۵(۱۸)	۱۷۸,۵(۱۵)
N1-H2N...O7 ⁱⁱ	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 ⁱⁱⁱ	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 ⁱⁱⁱ	۰,۹۲۸(۱۷)	۱,۹۳۰(۱۷)	۲,۸۵۵۶(۱۷)	۱۷۵,۳(۱۵)
N2-H6N...O6 ⁱⁱⁱ	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 ^{iv}	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

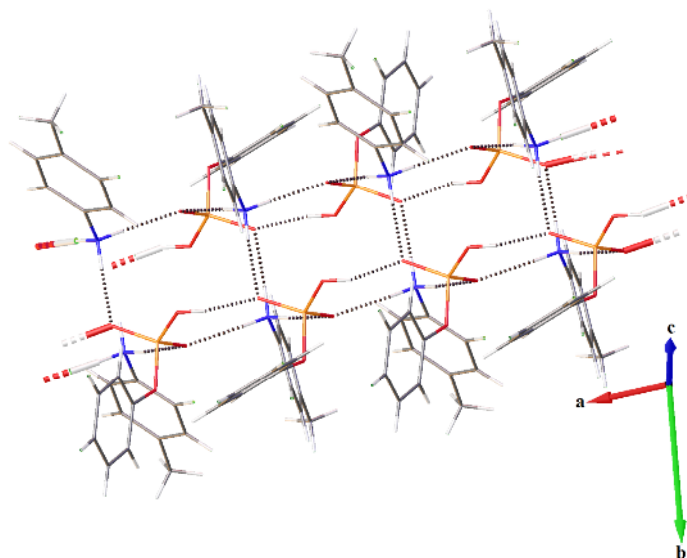
چنانکه گفته شد، سطوح هیرشفلد و نمودار اثر انگشتی از روش‌های آنالیز تصویری برهم‌کنش‌های بین مولکولی است [۱۵]. در این بخش آنالیز سطح هیرشفلد و نمودار دو بعدی اثر انگشتی برای بررسی برهم‌کنش‌های بین مولکولی در $[4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{NH}_3][(\text{C}_6\text{H}_5\text{O})\text{P}(\text{O})(\text{O})(\text{OH})]$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

برهم‌کنش‌های $(\text{O})\text{H}\dots\text{O}$ و $(\text{N})\text{H}\dots\text{O}$ 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 $\text{O}\dots\text{H}(\text{O})$ با کوتاه‌ترین فاصله $2,5123(13)\text{\AA}$ و $\text{O4}\dots\text{O6}$

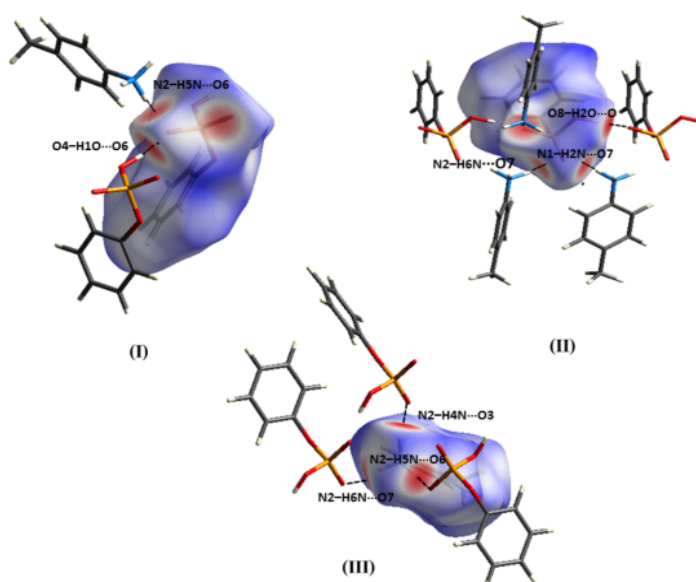
چنانکه در شکل ۳ آورده شده است، در ساختار بلوری این ترکیب، کاتیون‌ها و آنیون‌ها از طریق پیوندهای هیدروژنی، ساختار نردبانی یک بعدی را در امتداد محور a ایجاد می‌کنند. اکسیژن-های دو قطعه‌ای $[\text{P}(\text{O})(\text{O})]^-$ در این ساختار بلوری به عنوان پذیرنده پیوند هیدروژنی عمل می‌کنند و جالب است که یکی از این اکسیژن‌ها به عنوان پذیرنده‌ی سه پیوند هیدروژنی و باقی اکسیژن‌ها به عنوان پذیرنده‌ی دو پیوند هیدروژنی عمل می‌کنند. دو پیوند هیدروژنی $\text{O4}\dots\text{H1O}\dots\text{O6}$ و $\text{O8}\dots\text{H2O}\dots\text{O2}$ با فاصله $\text{O}\dots\text{O}$ برابر $2,5123(13)\text{\AA}$ و $2,5313(14)\text{\AA}$ 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 آنیون-های این ترکیب مشاهده می‌شود، پیوند بین اکسیژن‌های قطعه $[\text{P}(\text{O})(\text{O})]^-$ با گروه‌های N-H ۴-متیل فنیل آمونیوم است.

$H\cdots H$ و $C\cdots C$ (۰/۹)، کاتیون $N2$: $C\cdots H$ (۲۷/۴)،
 $O\cdots H$ (۲۰/۵)، $C\cdots C$ و $H\cdots H$ (۵۱/۸)، آنیون $P1$:
 $C\cdots H$ (۲۴/۵)، $O\cdots H$ (۴۳)، $C\cdots C$ و $H\cdots H$ (۳۱/۸)،
 آنیون $P2$: $C\cdots H$ (۱۹/۴)، $O\cdots H$ (۴۱/۱)،
 $C\cdots C$ و $H\cdots H$ (۳۸/۲)، (۰/۶).

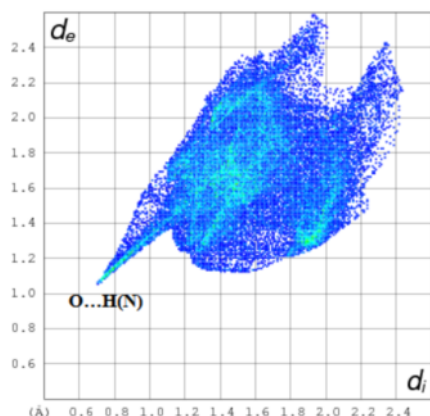
$O8\cdots O2 = ۲,۵۳۱۳(۱۴)$ Å و تک شاخک‌ها به برهم
 کنش $O\cdots H(N)$ در گستره $۲,۷۴۷۵(۱۸)$ Å تا
 $۳,۰۵۲۵(۱۷)$ Å تخصیص داده شد (شکل ۵). در شکل ۶
 درصد توزیع برهم‌کنش‌های متفاوت در چهار واحد کاتیونی و
 آنیونی نشان داده شد که به صورت زیرند:
 کاتیون $N1$: $C\cdots H$ (۳۰/۳)، $O\cdots H$ (۲۱/۴)، $C\cdots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



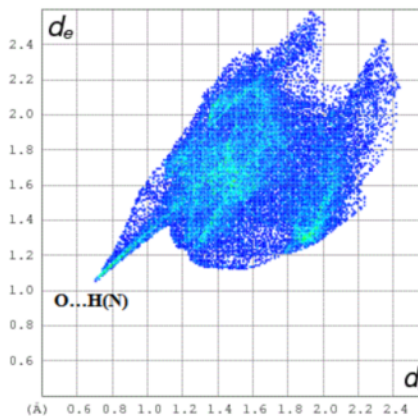
شکل ۳ شمایی از الگوی پیوند هیدروژنی در ترکیب $[4-CH_3-C_6H_4NH_3][(C_6H_5O)P(O)(O)(OH)]$.



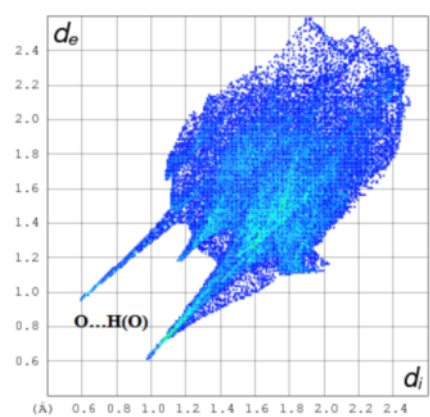
شکل ۴ سطوح هیرشفلد و برهم‌کنش‌های هیدروژنی در نمای پشت و جلو برای قطعه آنیونی $[(C_6H_5O)P(O)(O)(OH)]^-$ (P1) و (I و II) و قطعه کاتیونی $[4-CH_3-C_6H_4NH_3]^+$ (N1) (III) (شکل‌ها برای آنیون شامل اتم $P1$ و کاتیون شامل اتم $N1$ ترسیم شده است و برای آنیون مستقل و کاتیون مستقل دیگر سطوح مشابه‌ای به دست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



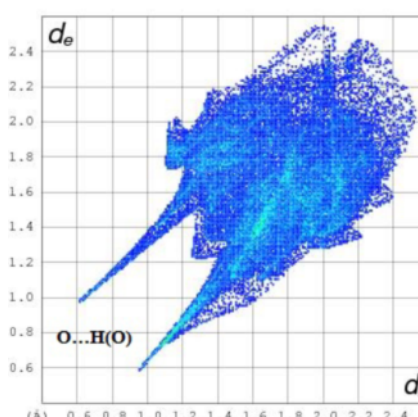
(ب)



(الف)

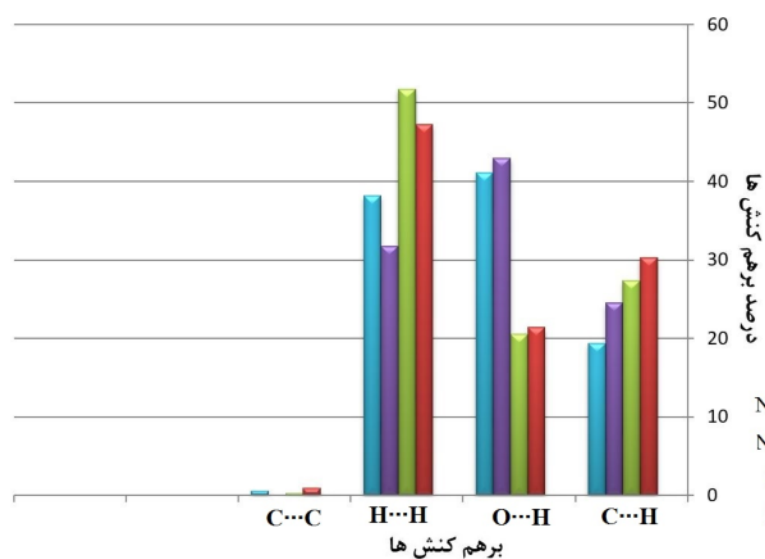


(ت)



(پ)

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 قابل دریافت است.

قدردانی

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

مراجع

- [1] Slepokura 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., Shariatnia Z., Khavasi H. R., "4-Carbamoylpyridinium dihydrogen phosphate", *Acta Crystallographica* E63 (2007) p. 4027.
- [6] Gholivand K., Pourayoubi M., Shariatnia 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, $(C_{10}H_{20}NH_2)PCL_2O_2$ ", *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*

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.,