

تهیه، بررسی ساختار بلوری و تجزیه و تحلیل سطح هیرشفلد یک ترکیب جدید راسمیک آمیدوفسفواستر

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

۱- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

۲- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه ماساریک، برنو CZ-۶۰۲۰۰، جمهوری چک

(دریافت مقاله: ۱۴۰۳/۷/۲۹، نسخه نهایی: ۱۴۰۳/۱۰/۲۲)

چکیده: ترکیب راسمی جدید ۲و۲-دی متیل، ۳و۱-پروپان دی آمین، N و N-بیس((O-فنیل) (سیکلوهگزیل آمیدو) فسفینات)، $(C_6H_5O)(C_6H_{11}NH)P(O)NHCH_2C(CH_3)_2CH_2NHP(O)(NHC_6H_{11})(OC_6H_5)$ تهیه و با روش‌های پراش پرتو ایکس و طیف‌سنجی بررسی شد. در ساختار بلوری آن، مولکول‌ها در یک آرایش دوبعدی موازی صفحه (۱-۱۰) با پیوندهای هیدروژنی $NH\cdots OP$ انباشته می‌شوند. ترکیب در سامانه بلوری تک میل با گروه فضایی $P2_1/n$ متبلور می‌گردد و واحد بی تقارن آن از یک مولکول تشکیل شده است. تجزیه و تحلیل سطح هیرشفلد برای آن انجام و نمودارهای اثر انگشت بررسی شدند.

واژه‌های کلیدی: آمیدوفسفواستر؛ ساختار بلوری؛ پیوند هیدروژنی؛ تجزیه و تحلیل هیرشفلد.

مقدمه

ارتباط ساختار مولکولی و ساختار بلوری آن‌ها بررسی شده که در این پژوهش‌ها، روش‌های مختلفی برای تهیه ترکیب‌های غیرکایرال، کایرال و راسمی ارائه شده است [۷-۹]. تهیه ترکیب‌های راسمی با سه گروه متفاوت متصل به فسفر نیازمند انجام واکنش‌ها به صورت مرحله-مرحله است و فرآیند جداسازی نمک تشکیل شده (ناشی از واکنش جاذب HCl و اسید کلریدریک جدا شده در آن مرحله) و فراورده اصلی چالشی است که نیاز به آگاهی از ویژگی‌های حلالیت حلال مورد استفاده در فرآیند واکنش دارد. در این زمینه پژوهش‌هایی پیرامون تهیه ترکیب‌های راسمی $(C_6H_{11}NH)P(O)(N(CH_3)(C_6H_{11}))(NHC_6H_4-4-CH_3)$ از خانواده فسفریک تری آمیدها و $(C_6H_5O)(C_6H_{11}NH)P(O)(NHCH_2C_6H_5)$ از خانواده آمیدوفسفواسترها پیشتر انجام شده است [۱۰، ۱۱]. در این پژوهش، ترکیب راسمی (خوشه سان) جدید ۲و۲-

در میان ترکیب‌های فسفر، فسفرآمیدها به دلیل داشتن کاربردهای متنوع و روزافزون بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. برخی از این ترکیب‌ها در صنایع کشاورزی به عنوان کود استفاده می‌شوند که این کاربرد به دلیل داشتن عناصر فسفر و نیتروژن است و نیز تعدادی از آن‌ها برای افزایش کارایی کودهای بر پایه اوره استفاده می‌شوند [۱]. همچنین برخی از آن‌ها به عنوان آفت کش در کشاورزی به کار می‌روند [۲، ۳]. گزارش‌هایی از استفاده فسفرآمیدها در صنایع دارویی وجود دارد که برای مثال به درمان انواع مختلف سرطان اشاره می‌شود [۴، ۵]. به تازگی این ترکیب‌ها به عنوان عامل بهبود دهنده کیفیت بسپارها چون عامل بازدارنده آتش یا برای بهبود شفافیت بسپارها نیز مورد توجه قرار گرفته‌اند [۶].

برهمکنش‌های متنوع مولکولی به ویژه برهمکنش‌های قوی از نوع پیوندهای هیدروژنی در ترکیب‌های دارای فسفرآمید و

*نویسنده مسئول، تلفن: ۰۹۳۵۵۱۶۷۲۴۸، پست الکترونیکی: fatemehkarimi150@yahoo.com

$(C_6H_5O)(C_6H_{11}NH)P(O)NHCH_2C(CH_3)_2CH_2NHP(O)(NHC_6H_{11})(OC_6H_5)$ به محلولی از (R, S)- $(Cl)P(O)(OC_6H_5)(NHC_6H_{11})$ در کلروفرم خشک، محلولی از ۲-۲-دی-متیل، ۱-۳-پروپان دی آمین و تری اتیل آمین (نسبت مولی ۲:۱:۲) در همان حلال در دمای صفر درجه سانتیگراد اضافه شد. پس از چهار ساعت هم زدن، حلال به وسیله پمپ خلا حذف شد و سپس فراورده با آب مقطر شسته شد و در مخلوط کلروفرم-n-هپتان در دمای اتاق متبلور شد.

M. p. 76 °C. **IR (KBr, cm^{-1}):** 3748, 3690, 3454, 3265, 3048, 3029, 2932, 2874, 1590, 1483, 1426, 1250, 1193, 1100, 939, 809, 762, 688. **$^{31}P\{^1H\}$ NMR** (121.79 MHz, DMSO- d_6 , 296.5 K, H_3PO_4 external): $\delta = 13.04$ ppm. **1H NMR** (300.84 MHz, DMSO- d_6 , 295.9 K, TMS): $\delta = 0.76$ (s, 6H), 1.09 (m, 10H), 1.49–1.81 (m, 10H), 2.64 (m, 4H), 2.91 (broad, 2H), 4.66 (t, $J = 10.2$ Hz, 2H), 4.81 (m, 2H), 7.08–7.12 (m, 2H), 7.17–7.21 (m, 4H), 7.29–7.34 (m, 4H) ppm. **$^{13}C\{^1H\}$ NMR** (75.66 MHz, DMSO- d_6 , 296.6 K, TMS): $\delta = 23.84$ (s), 25.50 (s), 25.66 (s), 35.59 (d, $^3J(P,C) = 5.3$ Hz), 35.75 (d, $^3J(P,C) = 4.5$ Hz), 36.52 (t, $^3J(P,C) = 4.5$ Hz), 48.01 (s), 50.58 (s), 120.98 (d, $^3J(P,C) = 4.5$ Hz), 121.00 (d, $^3J(P,C) = 4.5$ Hz), 123.90 (s), 129.63 (s), 152.36 (d, $^2J(P,C) = 6.8$ Hz).

دی متیل، ۱-۳-پروپان دی آمین، N و N-بیس((O-فنیل) (سیکلوهگزیل آمیدو) فسفینات) $(C_6H_5O)(C_6H_{11}NH)P(O)NHCH_2C(CH_3)_2CH_2NHP(O)(NHC_6H_{11})(OC_6H_5)$ با ساختار مولکولی شکل ۱ تهیه و بررسی گردید.

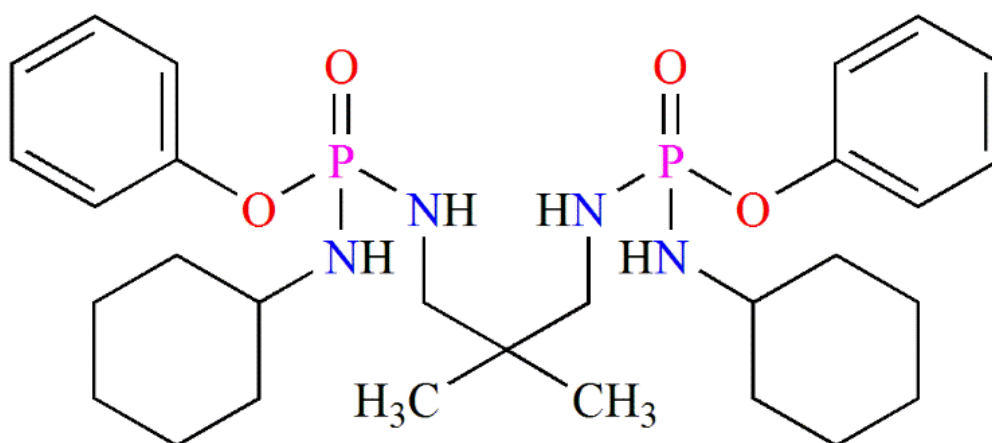
بخش تجربی

همه مواد استفاده شده در این کار با درجه خلوص تجزیه‌ای بودند.

طیف‌های تشدید مغناطیسی هسته‌ای (1H NMR (NMR)، ^{13}C NMR و ^{31}P NMR با طیف‌سنج Bruker Avance DRS ثبت شدند. تغییرات شیمیایی نسبت به تترامتیل سیلان (TMS) برای 1H و ^{13}C و H_3PO_4 ۸۵٪ برای ^{31}P ، به عنوان استاندارد تعیین شدند. طیف فروسرخ (IR) با یک طیف‌سنج Buck 500 با استفاده از قرص KBr ثبت شد. پراش پرتو ایکس با دستگاه Xcalibur, Sapphire2 و تابش $Mo K\alpha$ ($\lambda = 0.7107$ Å) بر تک بلور بی رنگ ترکیب انجام شد.

پیش ماده راسمی $(R, S)-(Cl)P(O)(OC_6H_5)(NHC_6H_{11})$ برپایه روشی که در کار پیشین گزارش شده بود [۱۱]، تهیه شد.

برای تهیه ۲-۲-دی-متیل، ۱-۳-پروپان دی آمین، N و N-بیس((O-فنیل) (سیکلوهگزیل آمیدو) فسفینات)،



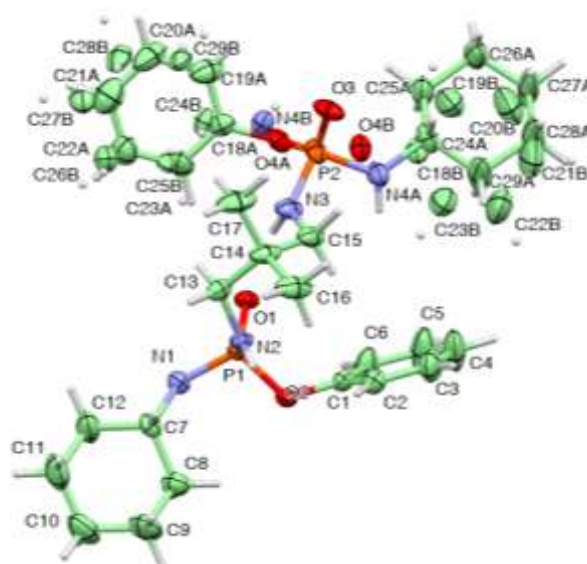
شکل ۱ ساختار شیمیایی ۲-۲-دی-متیل، ۱-۳-پروپان دی آمین، N و N-بیس((O-فنیل) (سیکلوهگزیل آمیدو) فسفینات).

بحث و نتیجه گیری

بررسی داده‌های بلورنگاری

این ترکیب در سامانه بلوری تک میل با گروه فضایی $P2_1/n$ متبلور می‌شود و واحد بی‌تقارن آن شامل یک مولکول کامل

است (شکل ۲). داده‌های بلورنگاری، طول و زوایای پیوند انتخابی و پارامترهای هندسی پیوند هیدروژنی در جدول‌های ۱، ۲ و ۳ ارائه شده است.



شکل ۲ ساختار مولکولی ۲و۲-دی متیل، ۱و۳-پروپان دی آمین، N و N-بیس ((O- فنیل) (سیکلوهگزیل آمیدو) فسفینات).

جدول ۱ داده‌های بلورنگاری و حل ساختار ترکیب تهیه شده.

۵۷۶۶۴	جرم فرمولی
۱۲۰ (۲) K	دما
$C_{29}H_{46}N_4O_4P_2$	فرمول تجربی
$0.71073 \text{ \AA}$	طول موج
تک میل	سامانه بلوری
$P2_1/n$	گروه فضایی
$a = 13.4560 (4) \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $b = 15.1852 (4) \text{ \AA}$, $\beta = 99.653 (3)^\circ$, $c = 15.5631 (5) \text{ \AA}$, $\gamma = 90^\circ$	ثابت های شبکه
$3135.01 (16) \text{ \AA}^3$	حجم
۴	Z
1.222 g cm^{-3}	چگالی (محاسباتی)
0.177 mm^{-1}	ضریب جذب
۱۲۴۰	F(000)
$0.60 \times 0.45 \times 0.40 \text{ mm}$	اندازه بلور
سفید، شکل چندضلعی	رنگ بلور
۲۷۵۶۴۶ تا ۲۹۷۰۷ درجه	گستره زاویه‌ای جمع آوری داده
$-16 \leq h \leq 16$, $-14 \leq k \leq 18$, $-12 \leq l \leq 18$	گستره‌های شاخص‌های میلر
۱۲۵۴۶	بازتاب‌های جمع آوری شده
$55.02 [R(\text{int}) = 0.152]$	بازتاب‌های مستقل
نیمه تجربی از اکی والان‌ها	تصحیح جذب
۰.۹۰۱۰ و ۰.۹۳۲۴	بیشینه و کمینه عبور
کمینه مربع‌های ماتریس کامل در F^2	روش حل ساختار
۵۵۰۲۲۳۴/۴۹۷	داده/بازداری/پارامترها
۱.۰۶۱	میزان انطباق در F^2
$R1 = 0.0405$, $wR2 = 0.1042$	شاخص‌های R نهایی [$I > 2\sigma(I)$]
$R1 = 0.0543$, $wR2 = 0.1077$	شاخص‌های R (همه داده‌ها)
۲۳۹۶۳۴۲	شماره کارت CCDC

جدول ۲ برخی از طول پیوندها (بر حسب Å) و زوایای پیوندی (بر حسب درجه).

پیوند	طول در مولکول	پیوند	زاویه در مولکول
P1-O1	۱,۴۷۶۶ (۱۳)	O1-P1-O2	۱۱۲,۲۷ (۷)
P1-O2	۱,۶۰۶۰ (۱۳)	O1-P1-N2	۱۱۳,۷۲ (۸)
P1-N1	۱,۶۲۴۶ (۱۶)	O1-P1-N1	۱۱۱,۵۷ (۸)
P1-N2	۱,۶۱۹۸ (۱۶)	O2-P1-N2	۱۰۳,۰۶ (۸)
P2-O3	۱,۴۴۶۸ (۱۴)	O3-P2-O4A	۱۲۴,۹۳ (۱۶)
P2-O4A	۱,۵۲۳ (۵)	O3-P2-N3	۱۱۴,۴۳ (۹)
P2-N4A	۱,۶۶۲ (۳)	O3-P2-N4A	۱۰۶,۰۶ (۱۳)
P2-N3	۱,۶۰۳۱ (۱۹)	O4A-P2-N3	۱۰۱,۱۹ (۱۸)

جدول ۳ ژئومتري پیوند هیدروژنی (°، Å).

D-H...A	D-H	H...A	D...A	D-H...A
N2-H2N...O3 (-x + 1/2, y + 1/2, -z + 3/2)	۰,۸۲۸ (۱۴)	۲,۰۲۰ (۱۵)	۲,۸۴۷ (۲)	۱۷۵,۹ (۱۹)
N3-H3N...O1	۰,۸۵۶ (۱۵)	۲,۰۱۰ (۱۷)	۲,۸۳۳ (۲)	۱۶۱ (۲)
N1-H1N...O1 (-x, -y + 1, -z + 1)	۰,۸۳۹ (۱۵)	۲,۱۲۵ (۱۶)	۲,۹۱۹۳ (۱۹)	۱۵۷,۹ (۱۹)

بعدی با تشکیل پیوندهای هیدروژنی N-H...OP ارتباط دارند و در آن، مانند ترکیب جدید تهیه شده، اتم‌های اکسیژن استری و نیتروژن نقشی در پیوندهای هیدروژنی به عنوان پذیرنده ندارند [۱۰].

تجزیه و تحلیل سطح هیرشفلد

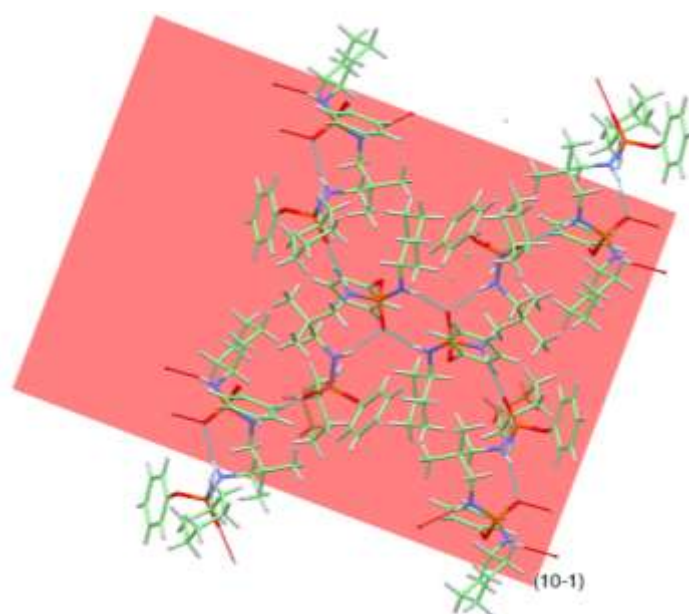
سطح هیرشفلد نمایشی برای حضور یک مولکول در یک بلور و تقسیم چگالی الکترونی بلور به قطعه‌های مولکولی ارائه می‌دهد. افزون بر این، سطح هیرشفلد برهمکنش‌های بین‌مولکولی را به همراه نمودارهای اثر انگشت دوبعدی نشان می‌دهد [۱۲]. نواحی قرمز روی سطوح هیرشفلد نشان‌دهنده تماس‌های نزدیک است که در آن‌ها فواصل کوتاه‌تر از مجموع شعاع‌های واندروالس هستند، در حالی که بخش‌های سفید تا آبی فواصل بزرگ‌تر از این مجموع را نشان می‌دهند [۱۳]. با توجه به وجود اختلال در پراش پرتو ایکس، در بررسی‌های هیرشفلد این ترکیب از داده‌های سازای عمده استفاده شد.

در شکل ۴، برهمکنش‌های بین مولکولی این ترکیب با استفاده از سطح هیرشفلد بر پایه‌ی d_{norm} نشان داده شده است. در این شکل، پیوندهای هیدروژنی با قدرت متوسط N-H...OP به صورت ناحیه‌های قرمز پررنگ و پیوندهای هیدروژنی ضعیف C-H... π به صورت ناحیه‌های قرمز روشن دیده می‌شوند.

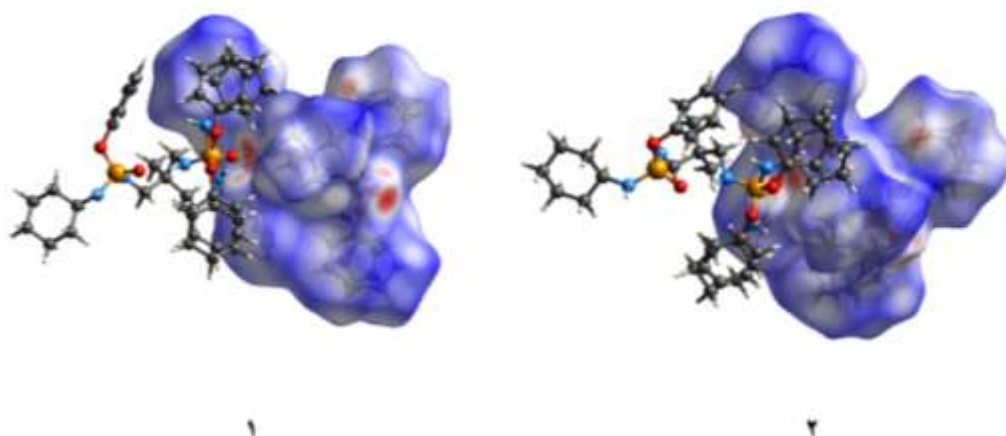
در این ترکیب، اتم‌های فسفر در یک محیط چهاروجهی (N)(N)(O)P(O) وایپیچیده قرار دارند و بیشینه و کمینه زاویه‌های پیوندی در اتم فسفر P1 به ترتیب O=P-N و O-P-N هستند. گروه‌های OC₆H₅ و C₆H₁₁NH متصل به P2 اختلال موقعیتی را با اشغال (۳):۰,۴۱۷ (۳):۰,۵۸۳ نشان می‌دهند. در این مولکول، دو قطعه P(O)(NHC₆H₁₁)(OC₆H₅) با یک اتصال دهنده NHCH₂C(CH₃)₂CH₂NH پل می‌شوند. نزدیکترین ساختار به این ترکیب، ساختار (C₆H₅O)(C₆H₁₁NH)P(O) NC₄H₈NP(O)(NHC₆H₁₁)(OC₆H₅) بوده که شامل دی آمین پل‌ساز برآمده از آمین نوع دوم است [۹].

به طور کلی، همه طول و زوایای پیوند به دست آمده با مقادیر مشاهده شده برای ساختارهای مشابه ایجاد شده با این اتم‌ها همخوانی دارند، برای مثال، طول پیوند P1=O1 و P2=O3 به ترتیب برابر با ۱,۴۷۷ و ۱,۴۴۷ آنگستروم هستند [۹].

در ساختار بلوری این ترکیب، مولکول‌ها در یک الگوی پیوند هیدروژنی دوبعدی موازی صفحه (۱-۱۰) و با تشکیل گروه‌بندی (N-H...)(N-H...OP) توسط اتم P1 و پیوند هیدروژنی N-H...OP توسط اتم P2 متصل می‌شوند. این الگو شامل نقش مایه‌های S(8) و R₂²(8) است (شکل ۳). در ساختار هم‌خانواده بیان شده نیز، مولکول‌ها در یک انبوه دو

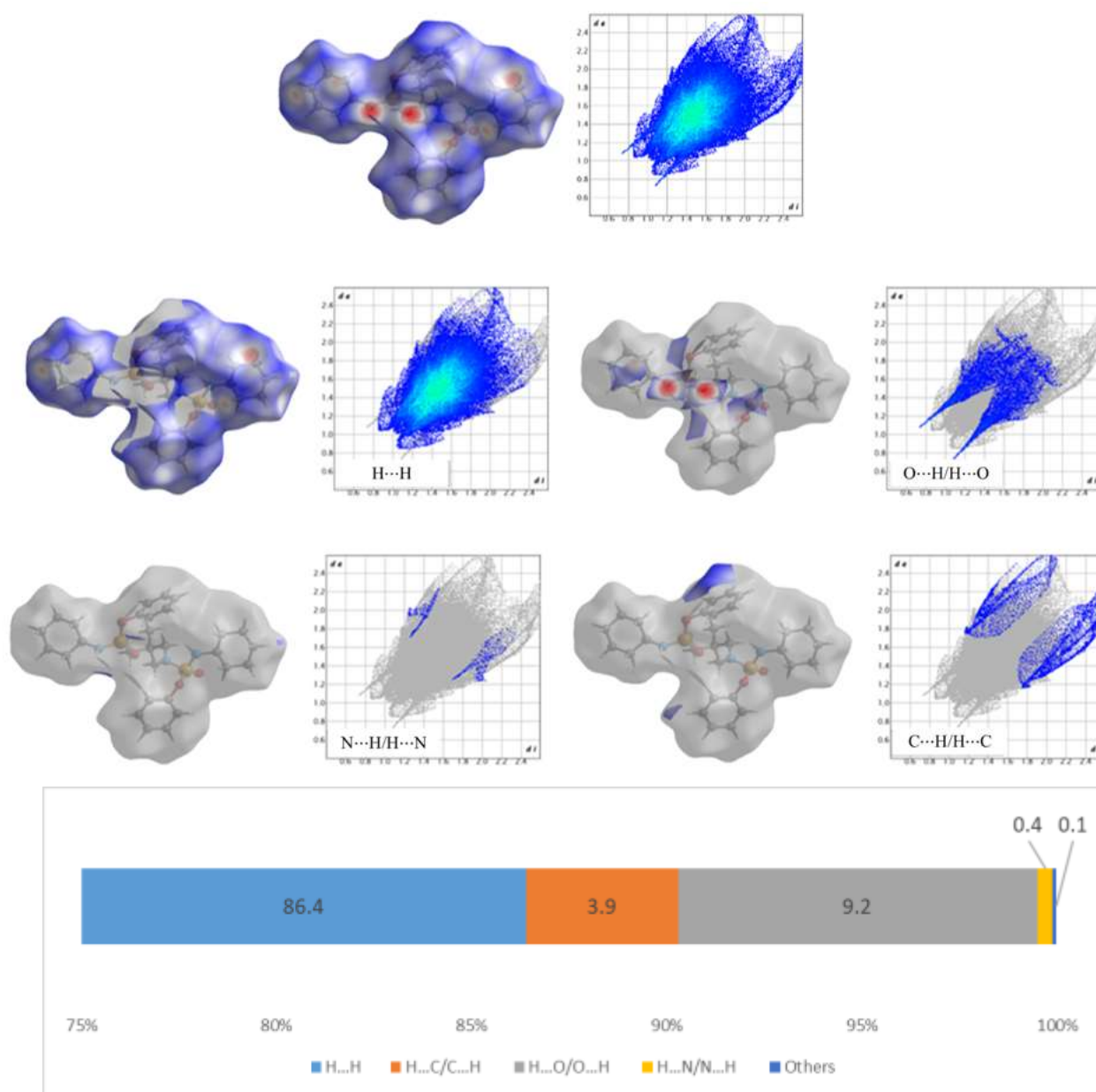


شکل ۳ الگوی پیوند هیدروژنی.

شکل ۴ نقشه‌های سطح هیرشفلد d_{norm} نشان‌دهنده (۱) پیوند هیدروژنی قوی $\text{N-H}\cdots\text{OP}$ و (۲) پیوند $\text{C-H}\cdots\pi$.

بیشترین سهم برهمکنش دیده شده مربوط به برخوردهای $\text{H}\cdots\text{H}$ و برابر با سهم ۸۶/۴ درصد از کل برهمکنش‌هاست. تماس‌های $\text{O}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{O}$ نزدیک‌ترین برهمکنش‌ها با کمینه $d_i + d_e$ برابر با ۱/۸ را نشان می‌دهند که به شکل دو علامت تیز مجزا دیده می‌شود. این برهمکنش ۹/۲ درصد از کل برهمکنش‌های این ترکیب را شامل می‌شود. برهمکنش‌های $\text{H}\cdots\text{C}$ و $\text{C}\cdots\text{H}$ سهم ۳/۹ درصد از کل برهمکنش‌ها را دارند و مربوط به برخوردهای $\pi\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\pi$ هستند که می‌تواند به صورت بال‌های مشخص در نمودار مربوطه دیده شود. برهمکنش‌های $\text{N}\cdots\text{H}$ و $\text{H}\cdots\text{N}$ دارای سهم ۰/۴ درصد از کل برهمکنش‌ها هستند.

نمودارهای اثر انگشت دوبعدی و درصد تماس‌های مختلف اتم-اتم در شکل ۵ نشان داده شده است. این نمودارها برآمده از برهمکنش‌های بین مولکولی در بلور و داده‌های تصویری خلاصه شده از تکرار d_i و d_e در سراسر سطح یک مولکول هستند. d_i و d_e به ترتیب فاصله یک نقطه از سطح هیرشفلد تا نزدیکترین اتم خارجی و فاصله یک نقطه از سطح هیرشفلد تا نزدیکترین اتم داخلی را نشان می‌دهند. هر نقطه در نمودار اثر انگشت دوبعدی مربوط به d_i و d_e بوده و رنگ هر ناحیه نشان دهنده مساحت نسبی این دو است. تجزیه نمودارهای اثر انگشت امکان تعیین سهم هر برهمکنش، که اغلب در اثر انگشت کامل همپوشی دارند، را فراهم می‌آورد [۱۲].



درصد برهمکنش‌ها در ترکیب تهیه شده.

شکل ۵ درصد برهمکنش‌ها در ترکیب تهیه شده و نقشه‌های دوبعدی اثر انگشت کامل و تجزیه شده به برهمکنش‌های CH/HC ، OH/HO ، H/H و NH/HN که درصد توزیع برهم کنش به کل سطح هیرشفلد مولکول را نشان می‌دهد.

طیف‌سنجی NMR

در طیف ^{13}C NMR، دوتایی‌ها در ۳۵/۵۹ ppm ($J = ۵/۳ \text{ Hz}$) و ۳۵/۷۵ ppm ($J = ۴/۵ \text{ Hz}$) مربوط به اتم‌های کربن قطعه سیکلوهگزیل با سه پیوند فاصله از فسفر هستند. سه‌تایی در ۳۶/۵۲ ppm ($J = ۴/۵ \text{ Hz}$) مربوط به اتم کربن قطعه $\text{NHCH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{NH}$ با سه پیوند فاصله از دو اتم فسفر است. اتم‌های کربن ارتو گروه‌های $\text{C}_6\text{H}_5\text{O}$ دو دوتایی در

علامت فسفر (^{31}P NMR) در ۱۳/۰۴ ppm ظاهر می‌شود. در طیف ^1H NMR، سه‌تایی در ۴/۶۶ ppm ($J = ۱۰/۲ \text{ Hz}$) و چندتایی در ۴/۸۱ ppm به ترتیب مربوط به واحدهای NH بخش‌های $\text{NHCH}_2\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{NH}$ و $\text{C}_6\text{H}_{11}\text{NH}$ هستند.

- Chem. 2021, 19 (47), 10296–10313. <https://doi.org/10.1039/D1OB01566D>.
- [5] Yu H., Yang H., Shi E., Tang W., "Development and Clinical Application of Phosphorus-Containing Drugs", *Medicine in Drug Discovery* 2020, 8, 100063. <https://doi.org/10.1016/j.medidd.2020.100063>.
- [6] Li M., Chen Y., Kong Z., Sun Z., Qian L., "Impact of a Novel Phosphoramidate Flame Retardant on the Fire Behavior and Transparency of Thermoplastic Polyurethane Elastomers", *ACS Omega* 2023, 8 (20), 18151–18164. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c01464>.
- [7] Sabbaghi F., Pourayoubi M., Nečas M., Damodaran K., "Two Single-Enantiomer Amidophosphoesters: A Database Study on the Chirality of (O)₂P(O)(N)-Based Structures", *Acta Cryst. C* 2019, 75 (1), 77–84. <https://doi.org/10.1107/S205322961801673X>.
- [8] Toghraee M., Pourayoubi M., Divjakovic V., "Study on H-Bond Patterns in Phosphoric Triamides Having a P(O)NHC(O) Skeleton, a Gauche Orientation of P(O) vs C(O) in New Compounds", *Polyhedron* 2011, 30 (10), 1680–1690. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2011.03.045>.
- [9] Ahmadabad F. K., Pourayoubi M., Nečas M., "Syntheses, Characterizations and Crystal Structures of Two New Racemic Amidophosphoesters: *rac*-(C₆H₅O)(cyclo-C₆H₁₁NH)P(O)N(C₄H₈)NP(O)(NH-cyclo-C₆H₁₁)(OC₆H₅) and *rac*-(*p*-CH₃-C₆H₄NH)P(O)(OC₆H₄-*p*-CH₃)(OC₆H₅)", *Crystallogr. Rep.* 2020, 65, 1145–1149. <https://doi.org/10.1134/S1063774520070020>.
- [10] Keikha M., Pourayoubi M., Tarahhomi A., Lee A., van der. "Syntheses and Structures of Four New Mixed-Amide Phosphoric Triamides", *Acta Cryst. C* 2016, 72 (3), 251–259. <https://doi.org/10.1107/S2053229616001595>.
- [11] Pourayoubi M., Karimi Ahmadabad F., Eshtiagh-Hosseini H., Kučeráková M., Eigner V., Dušek M., "New *Rac*-XP(O)(OC₆H₅)(NHC₆H₄-*p*-CH₃) [X = N(CH₃)(Cyclo-C₆H₁₁) and NH(C₃H₅)] and *Rac*-(C₆H₅CH₂NH)P(O)(OC₆H₅)(NH-Cyclo-

۱۲۰/۹۸ و ۱۲۱/۰۰ ppm ($J = ۴/۵$ Hz) برای هر دو) و اتم کربن ایپسو یک دوتایی در ۱۵۲/۳۶ ppm ($J = ۶/۸$ Hz) را نشان می‌دهند.

برداشت

مجموعه (C₆H₅O)(C₆H₁₁NH)P(O)NHCH₂C(CH₃)₂ CH₂NHP(O)(NHC₆H₁₁)(OC₆H₅) بررسی شد. در این ترکیب یک الگوی پیوند هیدروژنی دوبعدی موازی با صفحه (10-1) دیده می‌شود. نقشه سطح هیرشفلد تماس‌های نزدیک H...O را به صورت ناحیه قرمز تیره و تماس‌های ضعیفتر C...H را به صورت ناحیه قرمز روشن نشان می‌دهد. با توجه به نمودارهای اثر انگشت، برهمکنش‌های H...H سهم قابل توجهی را در این ساختار داشته و پس از آن، برهمکنش‌های H...O و H...C بیشترین سهم را دارند.

قدردانی

به این وسیله از دانشگاه فردوسی مشهد (۳/۵۷۰۷۶) و ۳/۴۱۹۲۷) و مسئولین محترم مجله بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران قدردانی می‌گردد.

مراجع

- [1] Domínguez M. J., Sanmartín C., Font M., Palop J. A., San Francisco S., Urrutia O., Houdusse F., García-Mina, J. M. "Design, Synthesis, and Biological Evaluation of Phosphoramidate Derivatives as Urease Inhibitors", *J. Agric. Food Chem.* 2008, 56 (10), 3721–3731. <https://doi.org/10.1021/jf072901y>.
- [2] Sharifi M., Ghadamyari M., Gholivand K., Ebrahimi Valmoozi A., "The Study of Insecticidal Effect of New Phosphoramidate Compounds on Some Insect Pests", *Plant Protection (Scientific Journal of Agriculture)* 2016, 39 (3), 39–49. <https://doi.org/10.22055/ppr.2016.12394>.
- [3] Itumoh E. J., Data S., Leitao E. M., "Opening up the Toolbox: Synthesis and Mechanisms of Phosphoramidates", *Molecules* 2020, 25 (16), 3684. <https://doi.org/10.3390/molecules25163684>.
- [4] Zhu Y. Y., Niu Y., Niu Y. N., Yang S. D., "Recent Advances in the Synthesis and Applications of Phosphoramides", *Org. Biomol.*

and Hirshfeld Surfaces of Four Methoxybenzaldehyde Oxime Derivatives, 2-MeO- $XC_6H_3C=NOH$ ($X = H$ and 2-, 3- and 4-MeO): Different Conformations and Hydrogen-Bonding Patterns", Acta Cryst E 2018, 74 (11), 1553–1560. <https://doi.org/10.1107/S2056989018014020>.

C_6H_{11}) Mixed-Amide Phosphinates", Acta Cryst. C 2013, 69 (10), 1181–1185. <https://doi.org/10.1107/S010827011302341X>.

[12] Spackman M. A., Jayatilaka D., "Hirshfeld Surface Analysis", CrystEngComm 2009, 11 (1), 19–32. <https://doi.org/10.1039/B818330A>.

[13] Gomes L. R., Souza M. V. N. de, Da Costa C. F., Wardell J. L., Low J. N., "Crystal Structures