

# تهیه، بررسی ساختار بلوری، آنالیز سطح هیرشفلد و محاسبه انرژی چارچوب‌های مولکولی یک ترکیب جدید فسفینیک آمید: $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$

نرجس پیمان<sup>۱</sup>، مهرداد پورایوبی<sup>۱\*</sup>، مارک نکاس<sup>۲</sup>

۱- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد

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

چکیده: در این پژوهش، ترکیب جدید  $N-(4\text{-کلروبنزیل})-P,P\text{-دی فنیل فسفینیک آمید}$ ،  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$ ، تهیه و با پراش پرتو  $X$  بر روی تک بلور تعیین ساختار گردید. این ترکیب در سیستم بلوری تتراگونال با گروه فضایی  $Z = 8$ ،  $\bar{4}$ ،  $a = 22/0010(2)$  Å و  $c = 7/0921(1)$  Å متبلور می شود و واحد بی تقارن شامل یک مولکول است. در ساختار بلوری، یک آرایش سه بعدی از اتصال مولکول‌ها با پیوندهای هیدروژنی  $N-H \cdots O=P$  و برهمکنش‌های  $C-H \cdots \pi$  ایجاد می شود. آنالیز سطح هیرشفلد، نمودار دو بعدی اثر انگشتی و انرژی شبکه برای بررسی برهمکنش‌های موجود در ساختار مطالعه شد.

واژه‌های کلیدی: ساختار بلوری، پیوند هیدروژنی، انرژی شبکه، آنالیز هیرشفلد، فسفینیک آمید

## مقدمه

فسفینیک آمیدها با فرمول عمومی  $RR'P(O)NR^1R^2$  = قطعه هیدروکربنی و  $R^1$  و  $R^2$  = هیدروژن یا قطعه هیدروکربنی (طبقه‌ای از ترکیبات فسفر در حالت اکسایش  $V$  هستند که کاربردهای گسترده‌ای را در داروسازی [۱]، بازدارنده‌های آتش [۲]، کاتالیزورها [۳]، شیمی کوئوردیناسیون [۴] و استخراج کننده‌های مایع و غشا [۵] دارند. متداول‌ترین روش‌ها برای سنتز فسفینیک آمیدها شامل واکنش فسفینیک هالیدها با آمین‌ها، واکنش دو مرحله‌ای کلرید فسفین با آمین‌ها و به دنبال آن اکسایش، و متراکم کردن اسیدهای فسفینیک با آمین‌ها است [۶].

در میان برهمکنش‌های غیر کووالانسی مختلف، بیشترین مطالعه به پیوند هیدروژنی اختصاص داشته است. در ترکیبات مبتنی بر فسفریل پیوند هیدروژنی  $N-H \cdots O=P$  به دلیل قطبیت گروه  $P=O$  یک برهمکنش شاخص است [۷ و ۸]. بررسی سطح هیرشفلد یک ابزار ارزشمند در تجزیه و تحلیل برهمکنش‌های بین مولکولی است [۹]. در این مقاله تجزیه و تحلیل ساختاری با پرتو  $X$ ، سطوح هیرشفلد و نمودار اثر انگشتی و چارچوب‌های انرژی برای ترکیب جدید  $N-(4\text{-کلروبنزیل})-P,P\text{-دی فنیل فسفینیک آمید}$  (شکل ۱) ارائه می‌شود.

بخش تجربی:

کلیه مواد استفاده شده در این تحقیق با خلوص تجزیه‌ای بالا مورد استفاده قرار گرفته‌اند. ساختار بلوری ترکیب به وسیله پراش پرتو  $K\alpha$  مولیبدن در دمای ۱۲۰ درجه کلوین تعیین و حل ساختار با استفاده از برنامه SHELXT انجام شد [۱۰ و ۱۱]. این ترکیب مطابق با روش آورده شده در مطالعات پیشین برای ترکیبات هم خانواده تهیه شد [۱۲] و تک بلور مناسب از آن با استفاده از حلال کلروفرم و  $\pi$ -هیپتان (با نسبت حجمی ۴ به ۱) به دست آمد.

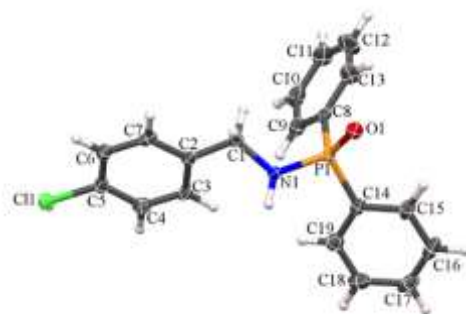


شکل ۱ ساختار شیمیایی  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$

بحث و نتیجه گیری:

بررسی داده های بلورنگاری  $N-(4\text{-کلروبنزیل})\text{-}P,P\text{-دی فنیل فسفینیک آمید}$

داده‌های بلورشناسی نشان می‌دهد که ترکیب سنتز شده در سیستم بلوری تتراگونال با گروه فضایی  $I4$  متبلور شده و واحد بی تقارن این ساختار شامل یک مولکول کامل است. ساختار این ترکیب (به صورت بیضوی های دمایی) در شکل ۲ نشان داده شده است. داده‌های بلورشناسی و برخی از طول پیوندها و زوایای پیوندی، و پیوندهای هیدروژنی به ترتیب در جدول‌های شماره ۱ تا ۳ آورده شده است.

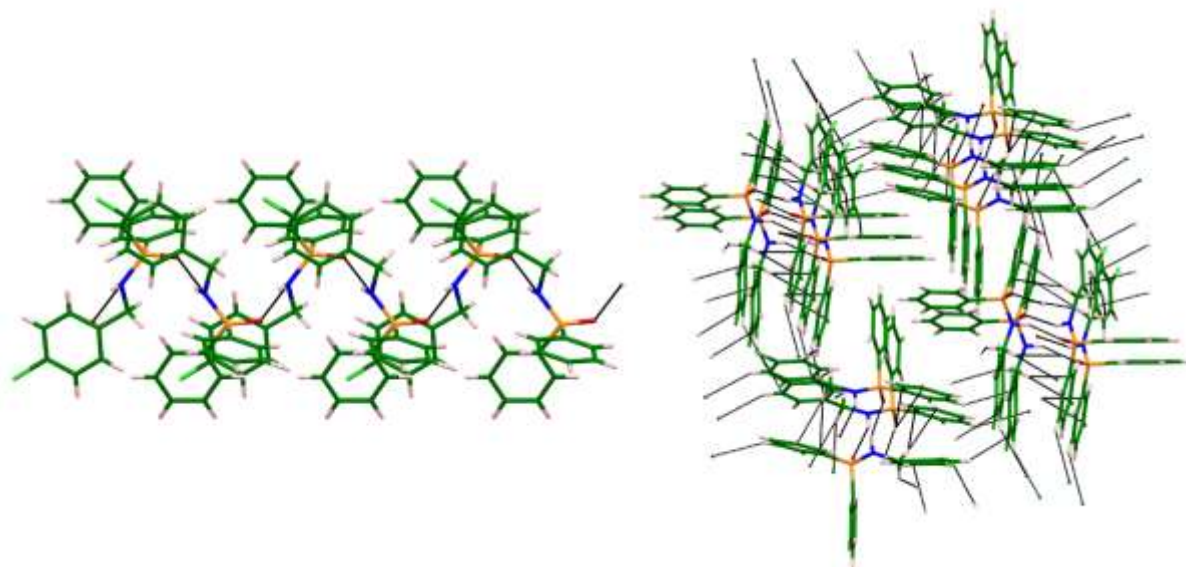


شکل ۲ نمایی از ساختار  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$  به صورت بیضوی‌های دمایی (بیضوی‌ها با احتمال ۵۰٪ رسم شده‌اند).

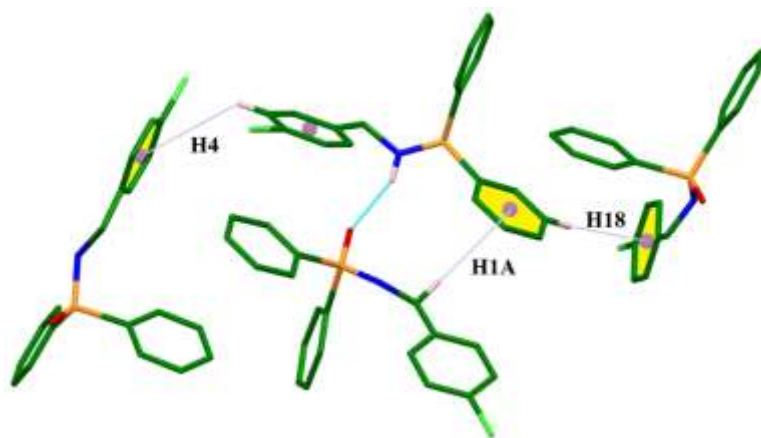
اتم فسفر در این ترکیب دارای پیکربندی چهاروجهی انحراف‌یافته است و بیشینه و کمینه زاویه‌های پیرامون اتم فسفر برابر با  $119.90(9)^\circ$  ( $O1-P1-N1$ ) و  $102.82(9)^\circ$  ( $N1-P1-C14$ ) است. طول پیوند فسفر-اکسیژن  $(1.4936(15) \text{ \AA})$  بلندتر از طول پیوند دوگانه نرمال  $P=O$  ( $1.45 \text{ \AA}$ ) و طول پیوند فسفر-نیتروژن  $(1.6422(18) \text{ \AA})$  کوتاهتر از پیوند ساده فسفر-نیتروژن  $(1.77 \text{ \AA})$  است [۱۳]. محیط اطراف اتم نیتروژن عملاً مسطح با مجموع زوایای  $360^\circ$  است و این اتم در پیوند هیدروژنی به عنوان

پذیرنده شرکت نمی‌کند. در ساختار بلوری این ترکیب، واحد NH یک جهت گیری ناودیس وار (synclinal) زاویه پیچشی برابر با  $77/79^\circ$  را نسبت به گروه فسفریل دارد و مولکول‌ها از طریق پیوند هیدروژنی  $N-H \cdots O$  ( $H1N \cdots O1$ )  $\text{\AA} = 2/10(2)$  در یک آرایش زنجیری یک بعدی در امتداد محور  $[001]$  منظم شده اند (شکل ۳، سمت چپ).

در این ساختار سه نوع مختلف از برهمکنش حلقه الکترونی  $C-H \cdots \pi$  نیز مشاهده می‌شود و با در نظر گرفتن این برهمکنش‌ها یک الگوی سه بعدی از تجمع مولکول‌ها ایجاد می‌شود (شکل ۳، سمت راست). این برهمکنش‌ها به صورت زیر است: (i) اتم  $H4$  حلقه  $4-Cl-C_6H_4$  با حلقه مشابه برهمکنش می‌کند (برهمکنش  $C4-H4 \cdots \pi$ ،  $Cg1 \cdots H4$   $\text{\AA} = 3/656$ ، مرکز حلقه  $4-Cl-C_6H_4$  =  $Cg1$ ). (ii) اتم  $H18$  حلقه فنیل به سمت حلقه  $4-Cl-C_6H_4$  جهت گیری می‌کند (برهمکنش  $C18-H18 \cdots \pi$ ،  $Cg1 \cdots H18$   $\text{\AA} = 3/676$ ). (iii) اتم  $H1A$  قطعه  $CH_2$  با حلقه فنیل برهمکنش می‌دهد (برهمکنش  $C1-H1A \cdots \pi$ ،  $Cg2 \cdots H1A$   $\text{\AA} = 3/323$ ، مرکز حلقه  $C_6H_5$  =  $Cg2$ ). در شکل ۴ این سه برهمکنش نشان داده شده است.



شکل ۳ طرحواره‌ای از الگوی پیوند هیدروژنی  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$ . (چپ) الگوی یک بعدی که با پیوند هیدروژنی  $N-H \cdots O=P$  ایجاد شده است. (راست) الگوی سه بعدی که پیوندهای هیدروژنی  $C-H \cdots \pi$  نیز لحاظ شده است.



جدول ۱ داده‌های بلورشناسی  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$

| فرمول شیمیایی                                                    | $C_{19}H_{17}ClNOP$                                                 |
|------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|
| جرم فرمولی ( $gmol^{-1}$ )                                       | ۳۴۱/۷۶                                                              |
| اندازه بلور (mm)                                                 | $0.25 \times 0.25 \times 0.20$                                      |
| سیستم بلوری                                                      | تتراگونال                                                           |
| گروه فضایی                                                       | $I\bar{4}$                                                          |
| $a$ (Å)                                                          | $22/0010(2)$                                                        |
| $b$ (Å)                                                          | $22/0010(2)$                                                        |
| $c$ (Å)                                                          | $7/0921(1)$                                                         |
| $\beta$ (°)                                                      | ۹۰                                                                  |
| حجم یاخته یکه ( $\text{\AA}^3$ )                                 | $3432/89(8)$                                                        |
| تعداد مولکول‌ها در یاخته یکه                                     | ۸                                                                   |
| چگالی ( $gcm^{-3}$ )                                             | $1/322$                                                             |
| دما (K)                                                          | ۱۲۰                                                                 |
| مقادیر $l$ $k$ $h$                                               | $-26 \leq l \leq +26$ , $-26 \leq k \leq +26$ , $-8 \leq h \leq +8$ |
| $[I > 2\sigma(I)]$ $wR_2$ و $R_1$                                | $0.0540$ و $0.0214$                                                 |
| (all data) $wR_2$ و $R_1$                                        | $0.0547$ و $0.0222$                                                 |
| $R_{int}$                                                        | $0.051$                                                             |
| تعداد پارامترها                                                  | ۲۱۱                                                                 |
| تعداد بازتاب‌های کل                                              | ۳۱۵۶                                                                |
| گستره $\theta$ (°) جمع آوری شده                                  | $1/848.0$ تا $30/967.0$                                             |
| $\mu$ ( $mm^{-1}$ )                                              | $0.32$                                                              |
| $\Delta\rho_{max}$ و $\Delta\rho_{min}$ ( $e \text{ \AA}^{-3}$ ) | $0.17$ و $-0.21$                                                    |
| $F(000)$                                                         | ۱۴۲۴                                                                |

جدول ۲ برخی از طول پیوندها (Å) و زوایای پیوندی (°) در شبکه بلوری  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$

| طول پیوند   |            |
|-------------|------------|
| P1—O1       | ۱/۴۹۳۶(۱۵) |
| P1—N1       | ۱/۶۴۲۲(۱۸) |
| P1—C14      | ۱/۸۰۲(۲)   |
| P1—C8       | ۱/۸۱۱(۲)   |
| Cl1—C5      | ۱۱۴/۶(۱۷)  |
| زاویه پیوند |            |
| O1—P1—N1    | ۱۱۹/۹۰(۹)  |
| O1—P1—C14   | ۱۱۲/۹۶(۹)  |
| O1—P1—C8    | ۱۰۹/۲۷(۹)  |
| N1—P1—C14   | ۱۰۲/۸۲(۹)  |
| C1—N1—P1    | ۱۲۰/۴۷(۱۵) |
| P1—N1—H1    | ۱۱۴/۶(۱۷)  |

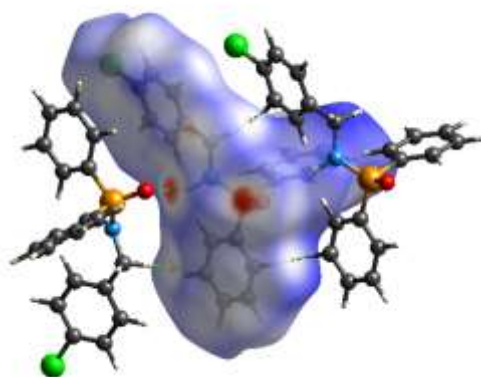
جدول ۳ داده‌های پیوند هیدروژنی  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$  (° و Å)

| $D-H\cdots A$                    | $D-H$     | $H\cdots A$ | $D\cdots A$ | $D-H\cdots A$ |
|----------------------------------|-----------|-------------|-------------|---------------|
| N1—H1N $\cdots$ O1 <sup>i</sup>  | ۰/۸۴۴(۱۹) | ۲/۱۰(۲)     | ۲/۸۸۶(۲)    | ۱۵۴(۲)        |
| C4—H4 $\cdots$ Cl1 <sup>ii</sup> | ۰/۹۵      | ۲/۹۵        | ۳/۶۵۹(۲)    | ۱۳۲/۹         |

Symmetry codes: (i)  $-x+1/2, -y+3/2, z-1/2$ ; (ii)  $-y+1/2, x+1/2, -z+1/2$

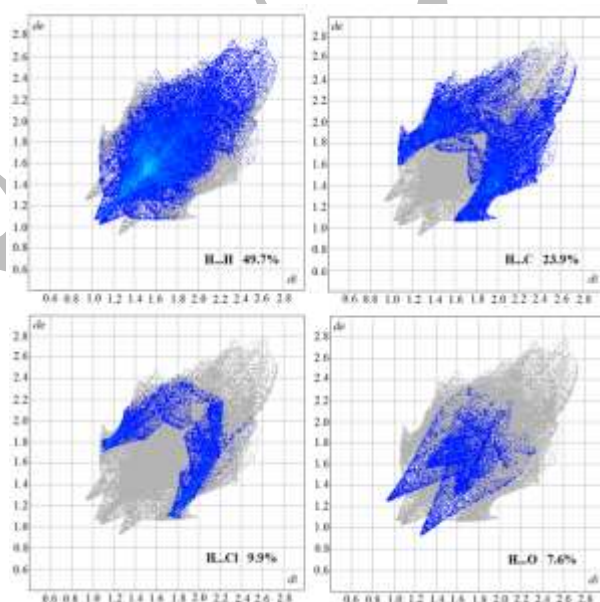
#### آنالیز سطح هیرشفلد و نمودار دو بعدی اثر انگشتی

تجزیه و تحلیل سطح هیرشفلد، شامل سطوح سه بعدی و نمودارهای اثر انگشتی دو بعدی، یک ابزار گرافیکی بسیار مفید برای شناسایی و درک برهمکنش‌های بین مولکولی در یک ساختار بلوری است [۹]. برای بررسی برهمکنش‌های بین مولکولی در  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$  از نرم‌افزار CrystalExplorer نسخه ۲۱/۵ استفاده شد [۱۴]. در سطوح سه بعدی هیرشفلد، نواحی قرمز رنگ فاصله  $d_i+d_e$  کمتر از مجموع شعاع واندروالس را نشان می‌دهند و نواحی سفید و آبی فاصله‌ای به ترتیب برابر و بیشتر از مجموع شعاع واندروالس را دارند ( $d_i$ : فاصله سطح تا نزدیکترین اتم داخل سطح،  $d_e$ : فاصله سطح تا نزدیکترین اتم خارج سطح) [۱۵]. در سطح هیرشفلد ترکیب تهیه شده (شکل ۵)، پیوند هیدروژنی  $N-H\cdots O=P$  به صورت ناحیه قرمز رنگ بزرگ و برهمکنش‌های  $H\cdots H$  و  $C-H\cdots \pi$  به صورت لکه‌های قرمز کم‌رنگ ظاهر شده‌اند (پیوند  $C1-H1A\cdots \pi$  برای نمونه نشان داده شده است).



شکل ۵ سطح هیرشفلد نشان دهنده برهمکنش‌های بین مولکولی  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$ ، دو مولکول خارج از سطح هیرشفلد برای نشان دادن پیوندهای هیدروژنی  $N-H \cdots O=P$  (سمت چپ بالا) و  $C-H \cdots \pi$  (سمت چپ پایین) و برهمکنش  $H \cdots H$  (سمت راست بالا و پایین) آورده شده است.

نمودارهای اثر انگشتی نماهایی گرافیکی را بر حسب  $d_i$  و  $d_e$  ارائه می‌دهند. این نمودارها (شکل ۶) نشان می‌دهند که در این ساختار برهمکنش  $H \cdots H$  بیشترین درصد از کل برهمکنش‌های بین مولکولی را شامل می‌شود (۴۹٪/۷). درصد توزیع دیگر برهمکنش‌های این ساختار به این ترتیب می‌باشد:  $H \cdots C$  (۲۳٪/۹)،  $H \cdots Cl$  (۹٪/۹)،  $H \cdots O$  (۷٪/۶)،  $Cl \cdots Cl$  (۲٪/۲)،  $Cl \cdots C$  (۰٪/۵) و  $O \cdots C$  (۰٪/۴).



شکل ۶ نمودارهای دو بعدی اثر انگشتی

## بررسی چارچوب های انرژی:

به منظور توصیف دقیق تر برهمکنش های بین مولکولی انباشتگی بلور، محاسبات انرژی شبکه بلوری با استفاده از نرم افزار CrystalExplorer نسخه ۲۱/۵ انجام شد. انرژی های الکترواستاتیک، پلاریزاسیون، پراکندگی و دافعه برهمکنش های بین مولکولی با استفاده از توابع چگالی الکترون CE-B3LYP/6-31G(d,p) محاسبه شد. مقدار انرژی کل ( $E_{tot}$ ) به کمک رابطه (۱) محاسبه می شود:

$$E_{tot} = K_{ele}E_{ele} + K_{pol}E_{pol} + K_{disp}E_{disp} + K_{rep}E_{rep} \quad (1)$$

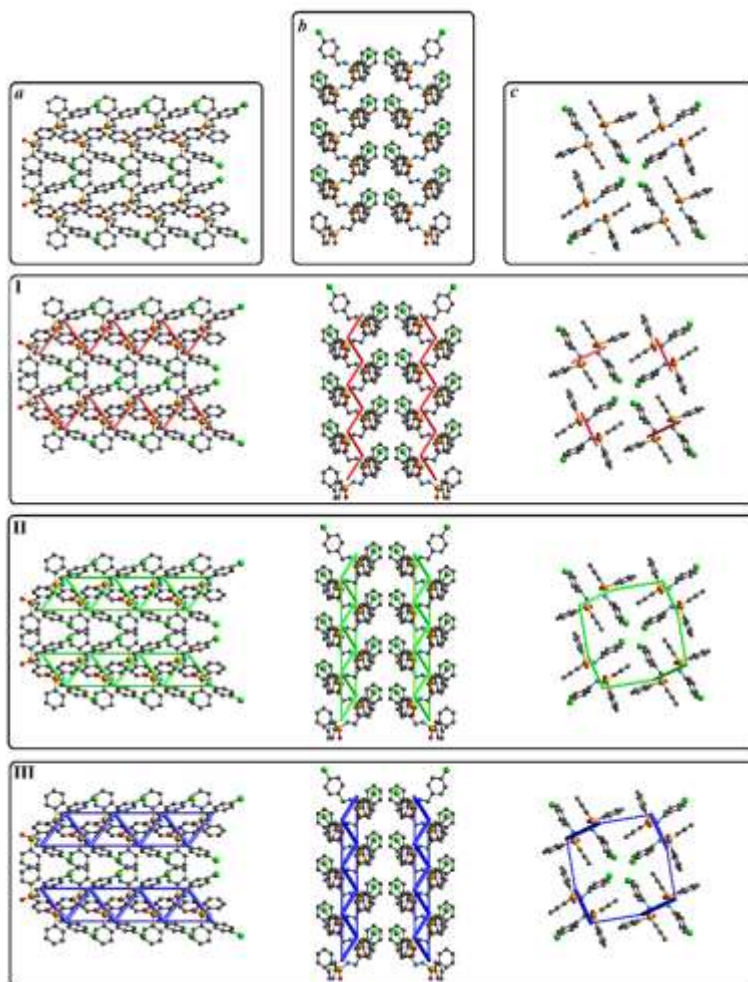
که در آن  $E_{ele}$ ,  $E_{pol}$ ,  $E_{disp}$  و  $E_{rep}$  به ترتیب اجزای الکترواستاتیک، پلاریزاسیون، پراکندگی و دافعه از انرژی کل و مقادیر  $K$  ضرایب تصحیح هر جزء است. داده های این محاسبات در جدول ۴ آورده شده است.

بیشترین میزان انرژی مربوط به جفت مولکولی دارای پیوند هیدروژنی  $N-H \dots O=P$  با مقدار ۶۱/۰- کیلوژول بر مول است. جفت های مهم دیگر با انرژی کل ۳۱/۱- و ۳۰/۳- کیلوژول به ترتیب مربوط به تجمع های دارای برهمکنش های  $H \dots H/Cl \dots H$  و  $C-H \dots \pi$  است.

چارچوب های انرژی بر حسب  $E_{dis}$ ,  $E_{ele}$  و  $E_{tot}$ ، به ترتیب با رنگ های قرمز، سبز و آبی در شکل ۷ نشان داده شده اند. با توجه به این شکل مشاهده می شود که نیروهای پراکندگی نسبت به نیروهای الکترواستاتیک سهم بیشتری از انرژی شبکه بلور را دارند و برهمکنش های الکترواستاتیک، همانند انرژی کل، بیشتر در راستای محور  $C$  (در راستای پیوند هیدروژنی) متمرکز شده است.

**جدول ۴** انرژی های برهمکنش جفت های مولکولی (بر حسب کیلوژول بر مول) از محاسبات چارچوب انرژی برای  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$  به دست آمده است.  $N$  تعداد جفت های مولکولی درگیر و  $R$  فاصله ی بین مراکز مولکولی بر حسب آنگستروم است.  $E_{ele}$ ,  $E_{pol}$ ,  $E_{dis}$  و  $E_{rep}$  به ترتیب نشان دهنده انرژی الکترواستاتیکی، پلاریزاسیون، پراکندگی و تبادله دافعه هستند.

| N | Symmetry operation      | R     | $E_{ele}$ | $E_{pol}$ | $E_{dis}$ | $E_{rep}$ | $E_{tot}$ |
|---|-------------------------|-------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| ۲ | $-y+1/2, x+1/2, -z+1/2$ | ۱۴/۰۷ | ۳/۶       | -۰/۱      | -۳/۲      | ۰/۰       | ۰/۹       |
| ۲ | $-x+1/2, -y+1/2, z+1/2$ | ۶/۱۸  | -۳۹/۶     | -۱۳/۵     | -۵۴/۲     | ۶۱/۷      | -۶۱/۰     |
| ۲ | $-y+1/2, x+1/2, -z+1/2$ | ۱۰/۲۳ | -۵/۸      | -۰/۸      | -۱۶/۴     | ۱۴/۸      | -۱۱/۹     |
| ۱ | $-x, -y, z$             | ۱۳/۸۱ | ۳/۶       | -۰/۱      | -۳/۶      | ۰/۰       | ۰/۶       |
| ۲ | $x, y, z$               | ۷/۰۹  | -۱۲/۰     | -۵/۴      | -۳۳/۷     | ۲۴/۱      | -۳۱/۱     |
| ۲ | $-y, x, -z$             | ۱۰/۴۲ | -۱/۷      | -۰/۵      | -۷/۱      | ۵/۲       | -۵/۱      |
| ۲ | $y, -x, -z$             | ۸/۰۹  | -۵/۰      | -۱/۳      | -۴۴/۹     | ۲۴/۴      | -۳۰/۳     |
| ۲ | $-y, x, -z$             | ۱۱/۰۸ | -۱/۰      | -۰/۳      | -۱۰/۲     | ۳/۴       | -۸/۱      |



شکل ۷ چارچوب های انرژی برای ترکیب تهیه شده. آرایش مولکولی به صورت گلوله و میله در راستای محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  نشان داده شده است. (I) نشان دهنده جزء الکترواستاتیکی (رنگ قرمز)، (II) نشان دهنده جزء پراکندگی (رنگ سبز) و (III) انرژی برهمکنش کلی (رنگ آبی) است. اتم های هیدروژن برای وضوح بیشتر حذف شده اند.

#### برداشت

در این پژوهش، ترکیب جدید  $N$ -(۴-کلروبنزیل)- $P$ -دی فنیل فسفینیک آمید تهیه شد. بررسی های بلورشناسی نشان می دهد که وجود پیوندهای هیدروژنی  $N-H \cdots O$  و  $C-H \cdots \pi$  در شبکه بلوری این ترکیب تجمع سه بعدی را ایجاد می کند. محاسبات چارچوب های انرژی نشان داد که نیروهای پراکندگی بیشترین سهم را در انرژی بلور دارند.

#### پیوست: داده های تکمیلی

اطلاعات کامل بلورشناسی ترکیب در پایگاه ساختاری کمبریج (CCDC) با شناسه ۲۳۷۵۴۴۳ به ثبت رسیده است و از آدرس [www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html](http://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html) قابل دریافت است.



نویسندگان نهایت سپاس و قدردانی را از دانشگاه فردوسی مشهد برای حمایت‌های پژوهشی از طرح ۳/۵۹۵۹۸ دارند.

## مراجع

1. Sørensen M. D., Blæhr L. K., Christensen M. K., Høyer T., Latini S., Hjarnaa P.-J. V., Björkling F., "Cyclic phosphinamides and phosphonamides, novel series of potent matrix metalloproteinase inhibitors with antitumour activity", *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 11 (2003) 5461–5484.
2. Liu X.-D., Zheng X.-T., Dong Y.-Q., He L.-X., Chen F., Bai W.-B., Lin Y.-C., Jian, R.-K., "A novel nitrogen-rich phosphinic amide towards flame-retardant, smoke suppression and mechanically strengthened epoxy resins", *Polymer Degradation and Stability*, 196 (2022) 109840.
3. Wu G.-J., Tan D.-X., Han F.-S., "The Phosphinamide-Based Catalysts: Discovery, Methodology Development, and Applications in Natural Product Synthesis", *Accounts of Chemical Research*, 54 (2021) 4354–4370.
4. Medeiros A. C. R. F., Gouvea M. M., Felipe T. V., de Carvalho Marques F. F., Bernardino A. M. R., Ortiz F. L., de Souza M. C., "New *o*-substituted diphenylphosphinic amide ligands: synthesis, characterization and complexation with  $Zn^{2+}$ ,  $Cu^{2+}$  and  $Y^{3+}$ ", *New Journal of Chemistry*, 43 (2019) 13881–13890.
5. Cherkasov R. A., Garifzyanov A. R., Koshkin S. A., "Synthesis of  $\alpha$ -Aminophosphine Oxides with Chiral Phosphorus and Carbon Atoms", *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, 186 (2011) 782–784.
6. Cheng F., Li D., Li J., Tang Y., Wu Y., Xu S., "Synthesis of Phosphinic Amides from Chlorophosphines and Hydroxyl Amines via P(III) to P(V) Rearrangement", *Organic Letters* 25 (2023) 2555–2559.
7. Hamzehee F., Pourayoubi M., Nečas M., Choquesillo-Lazarte D., "Extensive analysis of N—H...O hydrogen bonding in four classes of phosphorus compounds: a combined experimental and database study", *Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry*, 73 (2017), 287–297.
8. Saneei A., Pourayoubi M., Jasinski J. P., Jenny T. A., Crochet A., Fromm K. M., Keeley A. C., "The synergistic cooperation of NH...O and CH...O hydrogen bonds in the structures of three new phosphoric triamides", *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, 193 (2018) 257–266.
9. Spackman M. A., Jayatilaka D., "Hirshfeld surface analysis", *CrystEngComm*, 11 (2009) 19–32.
10. Sheldrick G. M., "Crystal structure refinement with SHELXL", *Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry*, 71 (2015) 3–8.
11. Sheldrick G. M., "SHELXT—Integrated space-group and crystal-structure determination", *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*, 71 (2015) 3–8.
12. Hamzehee F., Pourayoubi M., Farhadipour A., Choquesillo-Lazarte D., "Two new phosphinic amides: Synthesis, crystal structure, and theoretical study of hydrogen bonding", *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, 192 (2017) 359–367.
13. Corbridge D. E. C., *Phosphorus. An Outline of Its Chemistry, Biochemistry, and Technology*, Boca Raton (2013).
14. Spackman P. R., Turner M. J., McKinnon J. J., Wolff S. K., Grimwood D. J., Jayatilaka D., Spackman M. A., "CrystalExplorer: A program for Hirshfeld surface analysis, visualization and quantitative analysis of molecular crystals", *Journal of Applied Crystallography*, 54 (2021) 1006–1011.
15. McKinnon J. J., Jayatilaka D., Spackman, M. A., "Towards quantitative analysis of intermolecular interactions with Hirshfeld surfaces", *Chemical Communications*, 37 (2007) 3814–3816.