

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

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

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

۲- گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه ماساریک (Masaryk University)، کوتلارسکا ۲، برنو، کد پستی ۶۰۲۰۰، جمهوری چک

(دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۵/۴، نسخه نهایی: ۱۴۰۴/۷/۲۰)

چکیده: در این پژوهش،  $N-(4-کلروبنزیل)-P,P$ -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 سامانه بلوری چهارگوشی با گروه فضایی  $I\bar{4}$ ، با  $a$  و  $c$  متبلور می شود و واحد بی تقارن شامل یک مولکول است. در ساختار بلوری، یک آرایش سه بعدی از اتصال مولکول‌ها با پیوندهای هیدروژنی  $N-H...O=P$  و برهم کنش‌های  $C-H...π$  ایجاد می شود. تحلیل سطح هیرشفلد، نمودار دو بعدی اثر انگشتی و انرژی شبکه برای بررسی برهم کنش‌های موجود در ساختار انجام شد.

واژه‌های کلیدی: ساختار بلوری؛ پیوند هیدروژنی؛ انرژی شبکه؛ تحلیل هیرشفلد؛ فسفینیک آمید.

### مقدمه

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

در میان برهم کنش‌های غیرکووالانسی مختلف، بیشترین بررسی در مورد پیوند هیدروژنی بوده است. در ترکیب‌های برپایه فسفریل، پیوند هیدروژنی  $N-H...O=P$  به دلیل قطبی بودن گروه  $P=O$  یک برهم کنش شاخص است [۷، ۸].

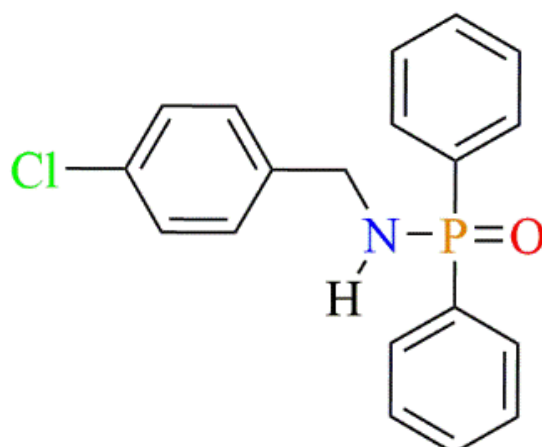
بررسی سطح هیرشفلد یک ابزار ارزشمند در تحلیل برهم کنش‌های بین مولکولی است [۹]. در این پژوهش، تحلیل ساختاری با پرتو  $X$ ، بررسی سطوح هیرشفلد و نمودار اثر انگشتی و چارچوب‌های انرژی برای ساختار جدید  $N-(4-کلروبنزیل)-P,P$ -دی فنیل فسفینیک آمید (شکل ۱) انجام شده است.

### بخش تجربی

همه مواد استفاده شده در این پژوهش دارای خلوص تجزیه‌ای بالا بودند. ساختار بلوری ترکیب با پراش پرتو  $X$ ، با پرتو  $K\alpha$  مولیبدن در دمای  $120^\circ C$  کلوین تعیین و حل ساختار با برنامه SHELXT انجام شد [۱۰، ۱۱]. این ترکیب با روش آورده شده در گزارش‌های پیشین برای ترکیب‌های هم خانواده تهیه شد [۱۲] و تک بلور مناسب آن با استفاده از حلال کلروفرم و  $n$ -هپتان (با نسبت حجمی ۴ به ۱) به دست آمد.

\*نویسنده مسئول، تلفن: ۰۵۱-۳۸۸۰۵۵۳۵، پست الکترونیکی: [pourayoubi@um.ac.ir](mailto:pourayoubi@um.ac.ir)





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

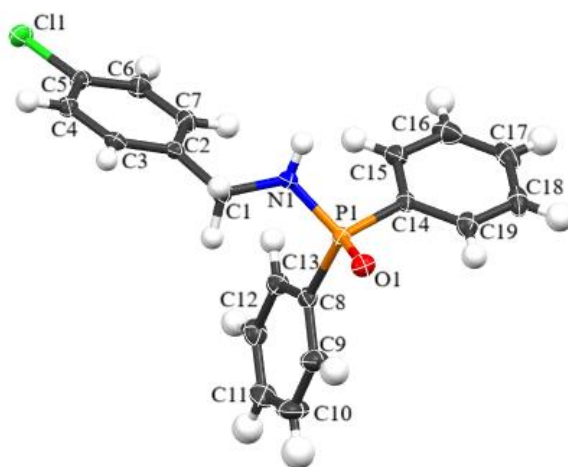
#### بحث و نتیجه گیری

#### بررسی داده‌های بلورنگاری $N-(4\text{-کلروبنزیل})\text{-}PP\text{-دی فنیل فسفینیک آمید}$

داده‌های بلورشناسی نشان می‌دهد که ترکیب سنتز شده در سامانه بلوری چهارگوشی با گروه فضایی  $I\bar{4}$  متبلور شده و واحد بی تقارن این ساختار شامل یک مولکول کامل است. ساختار این ترکیب (به صورت بیضوی‌های دمایی) در شکل ۲ نشان داده شده است. داده‌های بلورشناسی، برخی از طول پیوندها و زوایای پیوندی و پیوندهای هیدروژنی به ترتیب در جدول‌های ۱ تا ۳ آورده شده‌اند.

اتم فسفر در این ترکیب دارای پیکربندی چهاروجهی انحراف یافته است و بیشینه و کمینه زاویه‌های پیرامون اتم فسفر برابر با  $\angle(O1-P1-N1) = 119.90(9)^\circ$  و

$\angle(N1-P1-C14) = 102.82(9)^\circ$  هستند. طول پیوند فسفر-اکسیژن  $(1.4936(15) \text{ \AA})$  بلندتر از طول پیوند دوگانه عادی  $P=O$  ( $1.45 \text{ \AA}$ ) و طول پیوند فسفر-نیتروژن  $(1.6422(18) \text{ \AA})$  کوتاهتر از پیوند ساده فسفر-نیتروژن ( $1.77$ ) است [۱۳]. مجموع زوایای اطراف اتم نیتروژن نشان می‌دهد که از هندسه مسطح انحراف دارد. این اتم در پیوند هیدروژنی به عنوان پذیرنده شرکت نمی‌کند. در ساختار بلوری این ترکیب، واحد  $NH$  یک جهت‌گیری ناودیس‌وار ( $synclinal$ )، با زاویه پیچشی برابر با  $77.79^\circ$  را نسبت به گروه فسفریل دارد و مولکول‌ها با پیوند هیدروژنی  $N-H \cdots O$  (فاصله  $H1N \cdots O1$   $2.10(2) \text{ \AA}$ ) در یک آرایش زنجیری یک بعدی در راستای محور  $[001]$  منظم شده‌اند (شکل ۳ الف).



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).

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

|   |  |
|---|--|
| $C_{19}H_{17}ClNO_2$  | فرمول شیمیایی  |
| ۳۴۱٫۷۶  | جرم فرمولی ( $g\text{mol}^{-1}$ )                              |
| $0.25 \times 0.25 \times 0.20$                                | اندازه بلور (mm)   |
| چهارگوشی  | سامانه بلوری   |
| $I\bar{4}$  | گروه فضایی   |
| $22,0010(2)$  | $a$ (Å)  |
| $22,0010(2)$  | $b$ (Å)  |
| $7,0921(1)$   | $c$ (Å)  |
| ۹۰  | $\beta$ (°)  |
| $3432,89(8)$  | حجم یاخته یکبه ( $\text{Å}^3$ )                                |
| ۸   | تعداد مولکول‌ها در یاخته یکبه                                  |
| ۱٫۳۲۲   | چگالی ( $g\text{cm}^{-3}$ )                                    |
| ۱۲۰   | دما (K)  |
| $-8 \leq l \leq +8, -26 \leq k \leq +26, -26 \leq h \leq +26$ | مقادیر $l, k, h$   |
| $0.0540$ و $0.0214$   | $[I > 2\sigma(I)] wR_2$ و $R_1$                                |
| $0.0547$ و $0.0222$   | $wR_2$ و $R_1$ (همه داده‌ها)                                   |
| $0.0511$  | $R_{int}$  |
| ۲۱۱   | تعداد پارامترها  |
| ۳۱۵۶  | تعداد بازتاب‌های مستقل   |
| $1,848.0$ تا $30,967.0$                                       | گستره $\theta$ (°) جمع آوری شده                                |
| $0.319$   | $\mu$ ( $\text{mm}^{-1}$ )                                     |
| $0.167$ و $-0.214$  | $\Delta\rho_{max}$ و $\Delta\rho_{min}$ ( $e \text{ Å}^{-3}$ ) |
| ۱۴۲۴  | $F(000)$   |

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

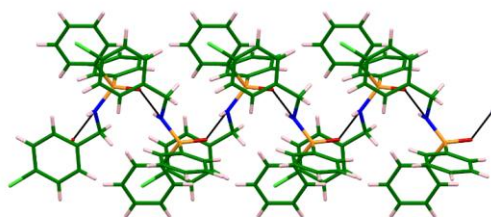
|             |            |
|-------------|------------|
| طول پیوند   |            |
| P1—O1       | ۱٫۴۹۳۶(۱۵) |
| P1—N1       | ۱٫۶۴۲۲(۱۸) |
| P1—C14      | ۱٫۸۰۲(۲)   |
| P1—C8       | ۱٫۸۱۱(۲)   |
| Cl1—C5      | ۱٫۷۴۵(۲)   |
| زاویه پیوند |            |
| O1—P1—N1    | ۱۱۹٫۹۰(۹)  |
| O1—P1—C14   | ۱۱۲٫۹۶(۹)  |
| O1—P1—C8    | ۱۰۹٫۲۷(۹)  |
| N1—P1—C14   | ۱۰۲٫۸۲(۹)  |
| C1—N1—P1    | ۱۲۰٫۴۷(۱۵) |
| P1—N1—H1N   | ۱۱۴٫۶(۱۷)  |

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

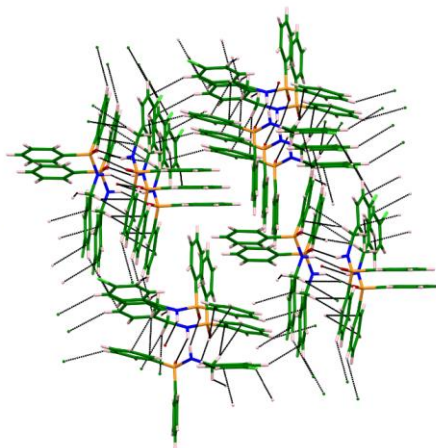
|                         |             |              |              |                |
|-------------------------|-------------|--------------|--------------|----------------|
| $D-H \cdots A$          | $D-H$       | $H \cdots A$ | $D \cdots A$ | $D-H \cdots A$ |
| $N1-H1N \cdots O1^i$    | $0.844(19)$ | $2.10(2)$    | $2.886(2)$   | $154(2)$       |
| $C4-H4 \cdots Cl1^{ii}$ | $0.95$      | $2.95$       | $3.659(2)$   | $132.9$        |

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

الف



ب



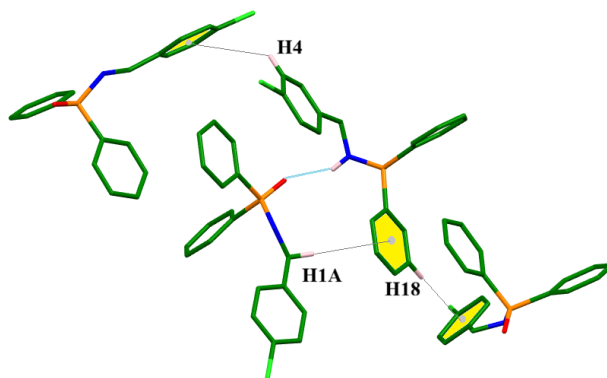
شکل ۳ طرحواره‌ای از الگوی پیوند هیدروژنی  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$ : (الف) الگوی یک بعدی که با پیوند هیدروژنی  $N-H...O=P$  ایجاد شده است. (ب) الگوی سه بعدی که پیوندهای هیدروژنی  $C-H...π$  نیز در نظر گرفته شده‌اند.

در این ساختار، سه نوع برهم‌کنش حلقه الکترونی  $C-H...π$  نیز دیده می‌شود و با در نظر گرفتن آن‌ها، یک الگوی سه‌بعدی از انباشت مولکول‌ها ایجاد می‌شود (شکل ۳ ب). در برهم‌کنش نوع اول، اتم  $H_4$  حلقه  $4-Cl-C_6H_4$  با حلقه مشابه برهم‌کنش می‌کند (برهم‌کنش  $C_4-H_4...π$ ،  $C_4-H_4...π$ ،  $H...Cg1$  به فاصله  $3.656 \text{ \AA}$ ،  $Cg1$  در مرکز حلقه  $4-Cl-C_6H_4$ ). در برهم‌کنش نوع دوم، اتم  $H_{18}$  حلقه فنیل به سمت حلقه  $4-Cl-C_6H_4$  جهت گیری می‌کند (برهم‌کنش  $C_{18}-H_{18}...π$ ،  $C_{18}-H_{18}...π$ ،  $H...Cg1$  به فاصله  $2.676 \text{ \AA}$ ). در سومین نوع برهم‌کنش، اتم  $H_{1A}$  از قطعه  $CH_2$  با حلقه فنیل برهم‌کنش می‌کند (برهم‌کنش  $C_1-H_{1A}...π$ ،  $C_1-H_{1A}...π$ ،  $H...Cg2$  به فاصله  $3.323 \text{ \AA}$ ،  $Cg2$  در مرکز حلقه  $C_6H_5$ ). در شکل ۴ این سه برهم‌کنش نشان داده شده‌اند.

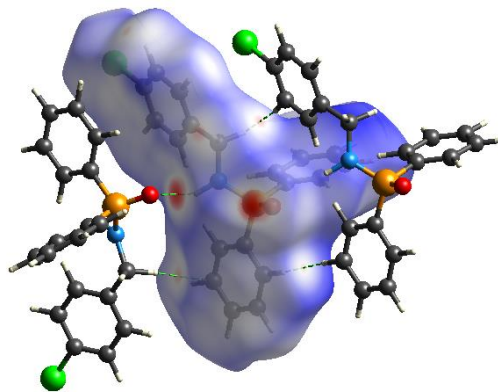
بررسی سطح هیرشفلد و نمودار دو بعدی اثر انگشتی تحلیل سطح هیرشفلد، شامل سطوح سه‌بعدی و نمودارهای اثر انگشتی دوبعدی، یک ابزار نگاشتاری بسیار مفید برای شناسایی برهم‌کنش‌های بین مولکولی در یک ساختار بلوری است [۹]. برای بررسی برهم‌کنش‌های بین مولکولی در نمودارهای اثر انگشتی نماهایی نگاشتاری را بر حسب  $d_i$  و  $d_e$  ارائه می‌دهند. این نمودارها (شکل ۶) نشان می‌دهند که در این ساختار، برهم‌کنش  $H...H$  بیشترین سهم ( $49.7\%$ ) از کل برهم‌کنش‌های بین مولکولی را دارد. درصد توزیع سایر برهم‌کنش‌های این ساختار  $H...C$  ( $23.9\%$ )،  $H...Cl$  ( $9.9\%$ )،  $H...O$  ( $7.6\%$ )،  $Cl...Cl$  ( $2.2\%$ )،  $Cl...C$  ( $0.5\%$ )،  $C...C$  ( $0.4\%$ ) و  $C...C$  ( $5.9\%$ ) می‌باشد.

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

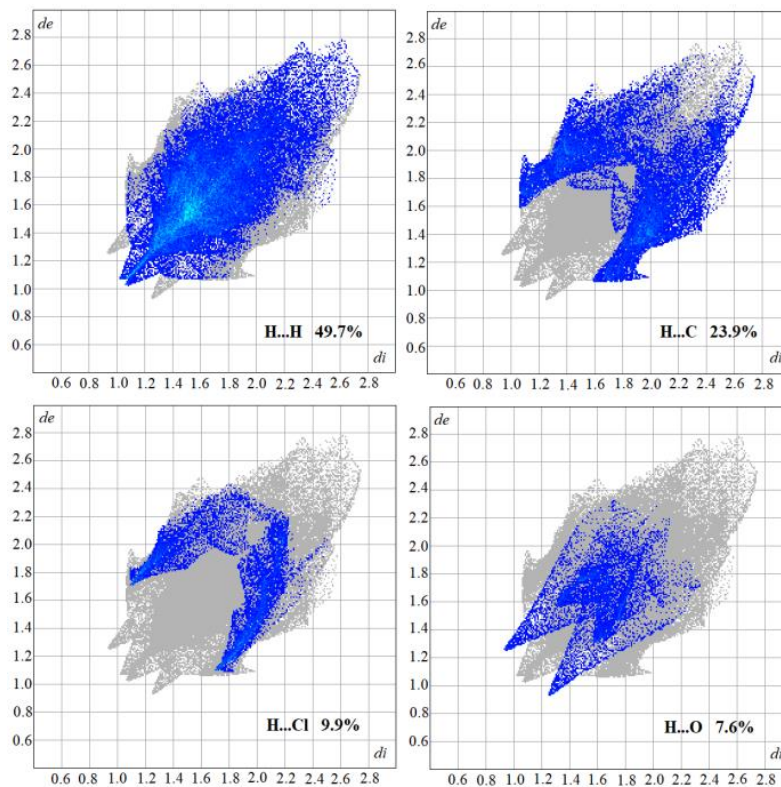
بررسی سطح هیرشفلد و نمودار دو بعدی اثر انگشتی تحلیل سطح هیرشفلد، شامل سطوح سه‌بعدی و نمودارهای اثر انگشتی دوبعدی، یک ابزار نگاشتاری بسیار مفید برای شناسایی برهم‌کنش‌های بین مولکولی در یک ساختار بلوری است [۹]. برای بررسی برهم‌کنش‌های بین مولکولی در



شکل ۴ سه برهم‌کنش متفاوت  $C-H...π$  که در ساختار  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$  دیده می‌شود.



شکل ۵ سطح هیرشفلد نشان دهنده برهم کنش‌های بین مولکولی در ساختار  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$ ، دو مولکول خارج از سطح هیرشفلد برای نشان دادن پیوندهای هیدروژنی  $N-H...O=P$  (سمت چپ بالا) و  $C-H...π$  (سمت چپ پایین) و برهم کنش  $H...H$  (سمت راست بالا و پایین) آورده شده‌اند.



شکل ۶ نمودارهای دو بعدی اثر انگشتی.

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

که در آن  $E_{ele}$ ،  $E_{pol}$ ،  $E_{disp}$  و  $E_{rep}$  به ترتیب سهم‌های الکتروستاتیک، قطبش، پراکندگی و دافعه از انرژی کل و مقادیر  $K$  ضرایب تصحیح هر جزء هستند. داده‌های این محاسبات در جدول ۴ آورده شده است.

بیشترین انرژی مربوط به جفت مولکولی با پیوند هیدروژنی  $N-H...O=P$  و برابر با  $-۶۱/۰$  کیلوژول بر مول است. جفت‌های مهم دیگر با انرژی کل  $-۳۱/۱$  و  $-۳۰/۳$  مول به

#### بررسی چارچوب‌های انرژی

به منظور توصیف دقیق‌تر برهم کنش‌های بین‌مولکولی در انباشتگی بلور، انرژی شبکه بلوری با نرم افزار CrystalExplorer نسخه ۲۱/۵ محاسبه شد. انرژی‌های الکتروستاتیک، قطبش، پراکندگی و دافعه برهم کنش‌های بین مولکولی با استفاده از توابع چگالی الکترون CE-B3LYP/6-31G(d,p) محاسبه شد. مقدار انرژی کل ( $E_{tot}$ ) با رابطه (۱) محاسبه می‌شود:

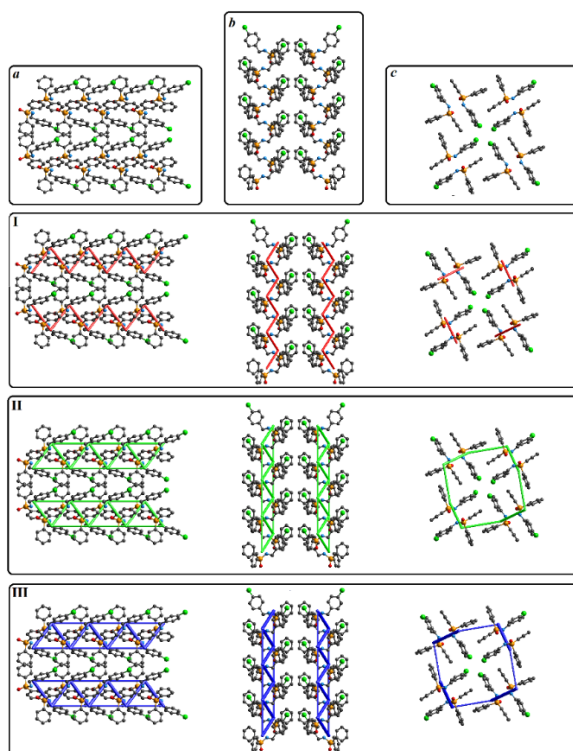
می‌شود که نیروهای پراکندگی نسبت به نیروهای الکترواستاتیک سهم بیشتری از انرژی شبکه بلور را دارند و برهم‌کنش‌های الکترواستاتیک، مانند انرژی کل، بیشتر در راستای محور  $c$  (در راستای پیوند هیدروژنی) متمرکز شده‌اند.

ترتیب مربوط به انبوهه‌های دارای برهم‌کنش‌های  $C-H \dots \pi$  و  $H \dots H/Cl \dots H$  هستند.

چارچوب‌های انرژی بر حسب  $E_{dis}$ ،  $E_{ele}$  و  $E_{tot}$ ، به ترتیب با رنگ‌های قرمز، سبز و آبی در شکل ۷ نشان داده شده‌اند. دیده

جدول ۴ انرژی‌های برهم‌کنش جفت‌های مولکولی (بر حسب کیلوژول بر مول) بر پایه محاسبه‌های چارچوب انرژی برای  $(C_6H_5)_2P(O)(NHCH_2C_6H_4-4-Cl)$ .  $N$  تعداد جفت‌های مولکولی درگیر و  $R$  فاصله‌ی بین مراکز مولکولی بر حسب آنگستروم است.  $E_{pol}$ ،  $E_{ele}$ ،  $E_{rep}$  و  $E_{dis}$  به ترتیب نشان دهنده انرژی الکترواستاتیکی، قطبش، پراکندگی و تبادل-دافعه هستند.

| N | عمل تقارنی              | 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     | ۴,۳       | -۸,۱      |



شکل ۷ چارچوب‌های انرژی برای ترکیب تهیه شده. آرایش مولکولی 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) نشانگر انرژی برهم‌کنش کلی (رنگ آبی) است. اتم‌های هیدروژن برای وضوح بیشتر حذف شده‌اند و مولکول‌ها به صورت گلوله و میله نشان داده شده‌اند. آرایش مولکولی بدون نشان دادن اجزاء انرژی در بالای شکل آورده شده است.

## برداشت

در این پژوهش، ساختار  $N$ -(۴-کلروبنزیل)- $P,P$ -دی فنیل فسفینیک آمید با پراش پرتو  $X$  بر روی تک بلور بررسی شد. بررسی‌های بلورشناسی نشان داد که در شبکه بلوری این ترکیب، پیوندهای هیدروژنی  $N-H\cdots O$  و  $C-H\cdots\pi$  انبوه سه بعدی را ایجاد می‌کنند. محاسبات چارچوب‌های انرژی دلالت بر این دارد که نیروهای پراکندگی بیشترین سهم را در انرژی بلور دارند.

## پیوست: داده‌های تکمیلی

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

## قدردانی

نویسندگان از دانشگاه فردوسی مشهد برای حمایت‌های پژوهشی از طرح ۳/۵۹۵۹۸ قدردانی می‌نمایند.

## 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  $N-H\cdots O$  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  $NH\cdots O$  and  $CH\cdots O$  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: Chemistry, biochemistry, and technology", CRC press, Boca Raton (2013) 70–108.

[15] McKinnon J. J., Jayatilaka D., Spackman, M. A., "*Towards quantitative analysis of intermolecular interactions with Hirshfeld surfaces*", Chemical Communications, 37 (2007) 3814–3816.

[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.