

ブチル基を有するジケトピロロピロール誘導体の新規な結晶相

(横浜国大院環境¹・東洋インキ²) ○室谷 典摩¹・岡田 直也¹・戸田 明宏²・今井 健吾²・関根 利成²・松本 真哉¹

A new crystal form of the diketo-pyrrolo-pyrrole derivative having butyl groups (¹*Yokohama National University Graduate School of Environment and Information Science*, ²*Tokyo Printing Ink*) ○Tenma Muroya,¹ Naoya Okada,¹ Akehiro Toda,² Kengo Imai,² Toshinari Sekine,² Shinya Matsumoto¹

Diketo-pyrrolo-pyrrole (DPP) is an industrially important pigment. DPP was reported to exhibit polymorphism by introducing alkyl group(s) at the amino group(s). The DPP derivative having a butyl group on both amino groups was found to have two differently-colored (yellow and red) polymorphs. We further obtained new orange platelet crystals by a liquid-liquid diffusion method using chloroform as a good solvent and n-hexane as a poor solvent. The molecular arrangement in this new polymorph is shown in Fig.1. In this polymorph, there found two asymmetric units illustrated as green and yellow molecules in Fig.1, and each asymmetric unit is stacked along the *b*-axis. The structural comparison with those of other two polymorphs and optical property measurement of the three polymorphs are in progress.

Keywords : *Diketo-pyrrolo-pyrrole; Polymorph; X-ray Structural Analysis; Optical Property*

ジケトピロロピロール (DPP) は、産業的に重要な顔料である。また、DPP はアミノ基へのアルキル基の導入により、結晶多形が発現することが報告されている。DPP の両方のアミノ基がブチル基で置換された誘導体からは、これまでに赤色と黄色の異なる色調を示す2つの結晶多形が得られている¹⁾。今回、新たに橙色の板状結晶を、良溶媒にクロロホルム、貧溶媒に *n*-ヘキサンを用いた液液拡散法によって得ることができた。新しい結晶相の分子配列を Fig.1 に示す。この結晶相は Fig.1 に緑色と黄色で示した2つの非対称単位を持ち、それぞれの非対称単位が *b* 軸に沿って積層していた。現在、他の2つの結晶多形との構造比較と光学特性に関して検討中である。

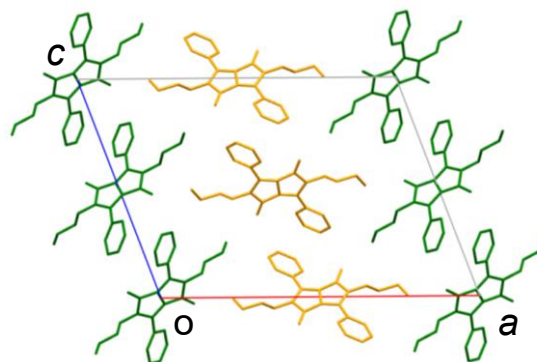


Fig.1 Molecular arrangement of the new orange polymorph of the DPP derivative.

1) 神藤他, 平成 29 年度日本結晶学会年会及び総会, OB-02