

N-ペンチルジケトピロロピロール誘導体の2つの結晶多形

(横浜国大院環境¹⁾ ○中井太一郎¹・松本真哉¹

Two polymorphs of *N*-pentylated diketopyrrolopyrrole derivative (¹*Graduate School of Environment and Information Sciences, Yokohama National University*)○Taichiro Nakai,¹ Shinya Matsumoto¹

Organic dyes have been applied as functional materials such as optoelectronic materials, in addition to their use as dyes and pigments. Chlorinated diketopyrrolopyrrole is used as a red pigment named Pigment Red 254 (PR254). Our group found three polymorphs from *N*, *N'*-dipropylated derivative of PR254¹⁾ and then also obtained three polymorphs of *N*-monopropylated derivative of PR254²⁾. In this research, we synthesized a derivative of PR254 with a pentyl group introduced into one of the amino groups (Fig.1, left) and carried out its crystallization. We found two crystal polymorphs of this derivative named R1 and R2 (Fig. 1 right). R1 was obtained by vapor-liquid diffusion method using THF/*n*-hexane, and R2 was obtained by liquid-liquid diffusion method using CHCl₃/*n*-hexane. Both polymorphs belong to the same space group $P\bar{1}$, although the number of asymmetric unit was different. There also found significant differences in their molecular conformation and molecular arrangement between these two polymorphs.

Keywords: Diketopyrrolopyrrole, Functional dye, Crystal polymorph

有機色素は、染料顔料などの用途に加え、光電子材料などの様々な機能性材料として利用されている。塩素化ジケトピロロピロールは Pigment Red 254(PR254)と呼ばれる赤色顔料として利用されている。これまで PR254 の両方のアミノ基にプロピル基を導入した誘導体¹⁾、及び、片方のアミノ基にプロピル基を導入した誘導体²⁾から、それぞれ3つの結晶多形が得られた。本研究では PR254 の片方のアミノ基にペンチル基を導入した誘導体(Fig.1 左)を合成し、その多形探索を行った。その結果、結晶化により2つの結晶多形が得られた(Fig.1 右)。R1はTHF/*n*-ヘキサン気液拡散法、R2はCHCl₃/*n*-ヘキサンの液液拡散法によって得られた。また、R1は加熱により動的挙動を示したが、R2は示さなかった。

2つの結晶多形はともに三斜晶系の空間群 $P\bar{1}$ の結晶であったが、非対称単位の数異なることに加え、分子構造と分子配列に異なる特徴を持っていた。

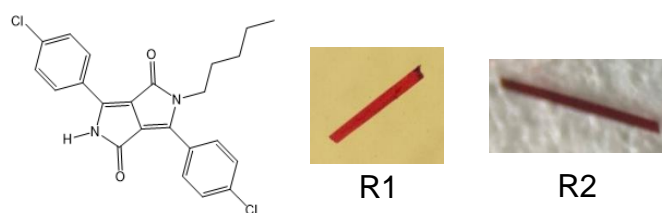


Fig. 1 Chemical structure of PRM5 (left) and its two polymorphs (right).

1) H.-S. So, S. Matsumoto, *Acta Cryst. B*, 2019, 75, 414-422.

2) Y. Kikuchi, S. Matsumoto, *CrystEngComm*, 2021, 23, 5882-5890.