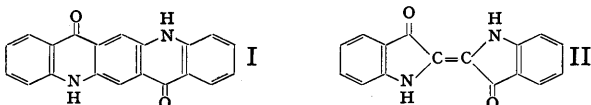


Kristallstrukturen organischer Pigmentfarbstoffe. I. γ -Chinacridon $C_{20}H_{12}O_2N_2$

H. KOYAMA, H.-J. SCHEEL und F. LAVES

Institut für Kristallographie und Petrographie,
Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich, Schweiz

Chinacridon [1] hat die Konstitutionsformel I und tritt in



drei Modifikationen α [2], β [3] und γ [4] auf. Für die γ -Form wurde die Raumgruppe $P 2_1/c$ (C_{2h}^5) bestimmt mit $a, b, c = 13,79 \text{ \AA}, 3,89 \text{ \AA}, 13,44 \text{ \AA}$, $\beta = 100^\circ 30'$ und zwei Molekülen pro Zelle. Fourier-Synthesen (h0l) und (hk0) zeigten, daß die äußeren Ringe längs der Richtung (nicht Bindung) HN... C=O um etwa 40° relativ zum zentralen Ring gewinkelt sind (Sesselform). Fig. 1a zeigt die Projektion der Moleküle auf (010). Durch zweizählige Schraubenachsen (durch $c = \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$

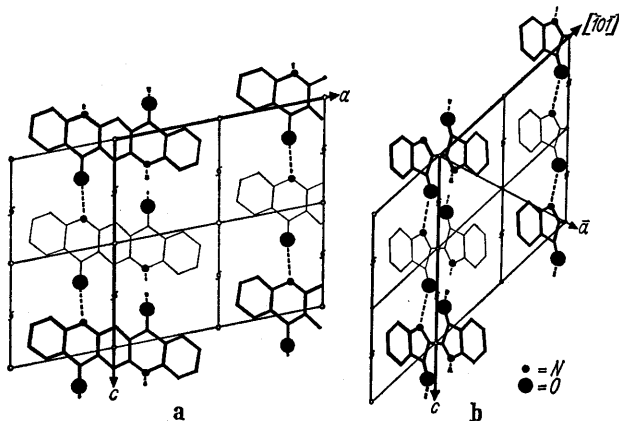


Fig. 1a u. b. Projektionen der Strukturen des Chinacridons (a) und des Indigos (b) in Richtung der b -Achse

und $a = 0$ gehend) kommen die oberen $\text{HN} \dots \text{C} = \text{O}$ -Faltungsachsen der dick gezeichneten Moleküle etwa auf gleiche Höhe wie die unteren Faltungsachsen der dünn gezeichneten Moleküle. Dadurch werden intermolekulare Wasserstoffbrücken ermöglicht, welche die Moleküle „wendeltreppenartig“ miteinander verbinden (vergleiche bezüglich Topologie der Wasserstoffbindungen [5]).

Interessant ist, daß die Kristallstruktur des Indigos (Konstitutionsformel II) [6] analog ist (gleiche Raumgruppe, gleiche Molekülzahl pro Zelle, topologisch gleiche Anordnung der Moleküle und der Wasserstoffbrücken, vgl. Fig. 1a und 1b). Die Molekülverschiedenheiten vernachlässigend sind also die beiden Kristallstrukturen „isotyp“ (diese „Isotypie“ wurde erst *nach* unserer Strukturbestimmung des γ -Chinacridons festgestellt). In beiden Fällen strahlen von jedem Molekül vier topologisch gleichartige Wasserstoffbindungen aus.

Eine ausführliche Mitteilung ist für die Z. f. Kristallographie vorgesehen. Der Firma CIBA AG in Basel danken wir für die Anregung zu dieser Arbeit und für finanzielle Unterstützung.

Eingegangen am 29. August 1966

[1] LIEBERMANN, H.: Liebigs Ann. Chem. 518, 245 (1935). — REEVE, T. B., u. E. C. BOTTI: Offic. Dig. 31, 991 (1959). — [2] US Patent 2.844.484. — [3] US Patent 2.844.485. — [4] US Patent 2.844.581. — [5] OGAWA, K., H.-J. SCHEEL u. F. LAVES: Naturwissenschaften 53, 700 (1966). — [6] ELLER, H. v.: Bull. soc. chim. France 106, 1426 (1955). — GRIBOWA, E. A., G. S. SHDANOV u. G. A. GOLDER: Kristallografiya 1, 53 (1956).