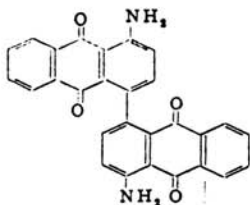


**Kristallstrukturen organischer Pigmentfarbstoffe. II.
4,4'-Diamino-1,1'-dianthrachinonyl $C_{28}H_{16}N_2O_4$**

K. OGAWA, H.-J. SCHEEL und F. LAVES

Institut für Kristallographie und Petrographie,
Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich

Dieser rote Pigmentfarbstoff [1] kristallisiert in der Raumgruppe Pbcn (D_{2h}^{14}) mit $a, b, c = 13,00 \text{ \AA}, 8,50 \text{ \AA}, 17,64 \text{ \AA}$ und mit vier Molekülen pro Zelle. Da die fast ebenen Molekülhälften wegen sterischer Hinderung nicht koplanar sind, liegen die Zentren der Moleküle nicht in Symmetriezentren,



sondern auf zweizähligen Achsen; der Winkel zwischen den beiden Anthrachinon-Anteilen des Moleküls beträgt etwa 105° , wobei 180° Koplanarität entsprechend obigem Konstitutionsschema bedeuten würde. Intermolekulare Wasserstoffbrücken verketten die Moleküle zu „Wänden“ parallel (001).

Fig. 1 zeigt eine solche Schicht. Zwischen den Schichten gibt es nur van der Waalsche Kräfte. Fig. 2A zeigt schematisiert die zweidimensional unendliche Verknüpfung der Moleküle

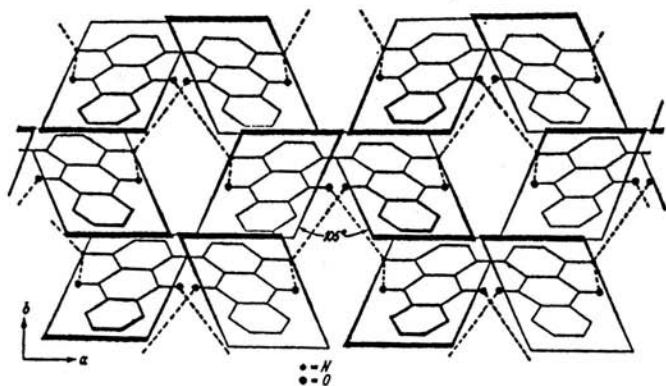


Fig. 1. Projektion des $C_{28}H_{16}N_2O_4$ parallel der c -Achse, die Verknüpfung der Anthrachinon-Ebenen andeutend. Gestrichelte Linien zeigen die Vernetzung der Moleküle durch Wasserstoffbindungen

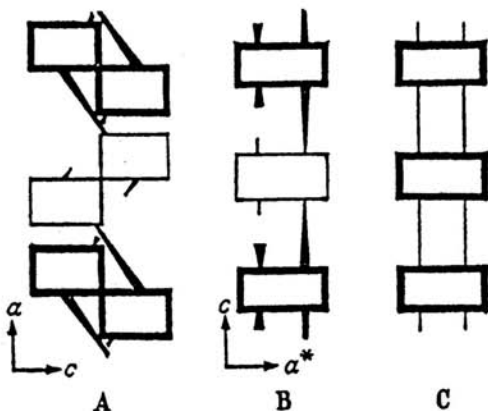


Fig. 2a—c. Schematische Projektionen der durch Wasserstoffbindungen verknüpften „Wände“ von $C_{14}H_{10}N_2O_4$ (A) und von Chinacridon bzw. Indigo (B). Eine formal mögliche H-Verknüpfung der Moleküle des Chinacridons bzw. Indigos zu eindimensional unendlichen Ketten zeigt (C)

durch Wasserstoffbrücken zu „Wänden“, um sie mit der ähnlichen, aber topologisch verschiedenen Wasserstoff-Verknüpfung des γ -Chinacridons (s. [2]) und der des Indigos (Fig. 2 B) zu vergleichen. Fig. 2 C zeigt noch eine *eindimensional* unendliche Anordnung, wie sie die Konstitutionsformeln des Chinacridons und des Indigos zwar erlauben würden, welche im Kristall aber nicht realisiert ist.

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

Eingegangen am 29. August 1966

[1] Brit. Patent 887.923, 889.746. — [2] Koyama, H., H.-J. Scheel u. F. Laves: Naturwissenschaften 53, 700 (1966).