

## **Intra- und intermolekulare H-Bindungen von Benzotriazol-UV-Stabilisatoren wurden durch 1D Kern-Overhauser-Effekt-Experimente nachgewiesen.**

**Jonathan Hobley,<sup>1#</sup> Vincenzo Malatesta<sup>2</sup>**

*1- OndaLabs R&D Consultancy, Deca Homes, Clark Free-Port, Mabalacat, Angeles, Philippinen 20102*

*# Die aktuelle Adresse Nationale Cheng Kung Universität, Lehrstuhl für Bioingenieurswesen, Universität Road, Tainan City, Taiwan, ROC, 70101*

*2- Universität Degli Studi di Milano-Bicocca, Lehrstuhl für Materialien, Milano, Italien.*

### **ABSTRACT**

Der UV-Absorber-Schutzmechanismus von 2-Hydroxyphenylbenzotriazolen basiert auf der Energiedissipation durch einen Protonentransfer im angeregten Zustand von der phenolischen OH-Gruppe auf den/die Triazol-Stickstoff(e). Mit Hilfe von <sup>1</sup>H-NMR NOE-Experimenten haben wir festgestellt, dass 2-(2'-Hydroxy-5'-methylphenyl)-benzotriazol (**UVA1**) in Chloroform als intramolekular H-gebundene Form vorliegt, während diese Bindung in DMSO durch die Bildung von intermolekularen H-Bindungen mit dem Lösungsmittel unterbrochen wird. Umgekehrt gilt für die Verbindungen 2-(2'-Hydroxy-3',5'-di(1,1-dimethylpropan))-benzotriazol (**UVA2**), und 3'-Methylen-Hydantoin-2-(2'-Hydroxy-5'-methylphenyl)-benzotriazol (**UVA3**), dass sie sperrige Substituenten in Ortho-Stellung zur phenolischen OH-Gruppe aufweisen, zeigen <sup>1</sup>H-NMR NOE-Experimente, dass der Wechsel des Lösungsmittels von DMSO zu Chloroform die Stärke der intramolekularen H-Bindung nicht nennenswert beeinflusst. Die Auswirkung der H-Bindungsstärke auf die UV-stabilisierende Wirksamkeit wurde diskutiert.

*Schlüsselwörter: Benzotriazol, UV-Stabilisator, Kern-Overhauser-Effekt NOE, Spin-Diffusion*