

Подтверждение внутри- и межмолекулярных водородных связей бензотриазольных УФ-стабилизаторов путем одномерных экспериментов с ядерным эффектом Оверхаузера

Джонатан Хобли,¹ Винченцо Малатеста²

1- OndaLabs R&D Consultancy, Deca Homes, Кларк Фри-Порт, Мабалакат, Анхелес, Филиппины, 20102

Текущий адрес Национальный университет Ченг Кунг, факультет биоинженерии, Университи Роуд, город Тайнань, Тайвань, Китай, 70101

2- Миланский университет Бикокка, Отдел материаловедения, Милан, Италия.

Аннотация

Механизм защиты 2-гидроксифенилбензотриазолов УФ-поглотителем основан на диссипации энергии за счет переноса протона в возбужденном состоянии от фенольной группы ОН к триазольному азоту (ам). Используя 1Н-ЯМР-эксперименты с НОЕ, мы установили, что 2- (2'-гидрокси-5'-метилфенил) -бензотриазол (УФА1) существует в хлороформе в виде внутримолекулярной Н-связанной формы, тогда как в ДМСО эта связь разрывается с образованием межмолекулярной Н-связи с растворителем. И наоборот, для соединений 2- (2'-гидрокси-3', 5'-ди (1,1-диметилпропан)) бензотриазол (УФА2) и 3'-метил-2- (2'-гидрокси-5'-метилфенил) -бензотриазол (УФА3), имеющих объемные заместители орто относительно фенольной ОН-группы. Эксперименты 1Н-ЯМР НОЕ показывают, что при замене растворителя с ДМСО на хлороформ на прочность внутримолекулярной Н-связи существенно не влияет. Обсуждается влияние прочности водородных связей на эффективность УФ-стабилизации.

Ключевые слова: бензотриазол, УФ-стабилизатор, ядерный эффект Оверхаузера, НОЕ, спиновая диффузия.