Научная статья
УДК 547.791.8
DOI: 10.52957/2782-1900-2026-7-3-11-21

СИНТЕЗ УФ-АБСОРБЕРОВ НА ОСНОВЕ *N*-(2-АМИНОАРИЛ)ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОТРИАЗОЛА

А.И. Хлопотинин[1], И.М. Чувакова[1], И.В. Тихонов[1], Ж.В. Чиркова[2], Р.С. Бегунов[1]

Александр Игоревич Хлопотинин, канд. хим. наук, инженер-химик; **Ирина Михайловна Чувакова**, студент; **Иван Викторович Тихонов**, канд. хим. наук, доц.; **Жанна Вячеславовна Чиркова**, докт. хим. наук, проф.; **Роман Сергеевич Бегунов**, канд. хим. наук, доц.

[1] ФГБОУ ВО «Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова», 150003, Россия, г. Ярославль, ул. Советская, д. 14, *begunov@bio.uniyar.ac.ru*

[2] ФГБОУ ВО «Ярославский государственный технический университет», 150023, Россия, г. Ярославль, Московский пр., д. 88, *chirkovazhv@ystu.ru*.

Ключевые слова:
УФ-абсорберы, N-(2-аминоарил)-бензотриазолы, реакция S_NAr, восстановление, УФ спектры, диапазон длин волн 280-200 нм, 315-280 нм и 400-315 нм, квантово-химическое моделирование

Аннотация. *В ходе реакций ароматического нуклеофильного замещения и восстановления получены смеси 1-(2-NH_2-4-CF_3-фенил)-1H- и 2-(2-NH_2-4-CF_3-фенил)-2H-бензотриазола, содержащие 1- и 2-замещенные изомеры в различных соотношениях. Изучена интенсивность УФ абсорбции смесями данных аминосоединений. Все смеси аминопроизводных бензотриазола обладали абсорбцией в диапазонах 280-200 нм, 315-280 нм и 400-315 нм. С увеличением содержания в смеси 2-замещенного изомера способность поглощать UVA и UVB излучение усиливалась. При преобладании в смеси 1-замещенного производного более интенсивно абсорбировались UVC лучи. Наиболее перспективной оказалась смесь, содержащая 1- и 2-замещенные изомеры в соотношении 1 : 0.49, которая обладала сплошной и значительной абсорбцией во всем изучаемом диапазоне УФ спектра. По результатам квантовохимических расчетов показано, что гипсохромный сдвиг максимумов поглощения в УФ-спектре 1-замещенного изомера обусловлен стерическими затруднениями, которые делают молекулу существенно неплоской и нарушают сопряжение между бензотриазольным и анилиновым фрагментами. Это приводит к увеличению энергетической щели между ВЗМО и НВМО и возрастанию энергии электронных переходов.*

Для цитирования:
Хлопотинин А.И., Чувакова И.М., Тихонов И.В., Чиркова Ж.В., Бегунов Р.С. Синтез УФ-абсорбентов на основе *N*-(2-аминоарил)производных бензотриазола // От химии к технологии шаг за шагом. 2026. Т. 7, вып. 3. С. 11-21. URL: https://chemintech.ru/ru/nauka/issue/7500/view

© А.И. Хлопотинин, И.М. Чувакова, И.В. Тихонов, Ж.В. Чиркова, Р.С. Бегунов, 2026

Введение

Полимерные материалы в ходе эксплуатации могут подвергаться различным неблагоприятным физико-химическим воздействиям, особое значение среди которых имеет УФ-излучение, приводящее к деградации полимера [1-3]. Для предотвращения фотодеградации используют различные светостабилизаторы. Из них наибольшее распространение получили УФ-абсорберы [4-7].

В качестве таких добавок чаще всего применяют различные алкильные производные 2-(2*H*-бензотриазол-2-ил)фенола [8-13] или *орто*-гидроксибензофеноны [14, 15] (рис. 1).

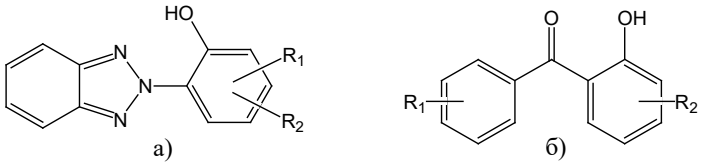


Рис. 1. Наиболее распространенные УФ-абсорберы: а) производные 2-(2*H*-бензотриазол-2-ил)фенола (Тинувины), б) производные 2-гидроксибензофенона

Механизм действия УФ-абсорберов основан на возможности перехода молекул из основного электронного состояния (**A**) в возбуждённое (**B**) [16], что характерно для 2-(2H-бензотриазол-2-ил)фенолов (схема 1). Возбуждённое синглетное состояние (**B**) релаксирует в течение ~ 100 фс за счёт адиабатического переноса протона на азот триазольного кольца, в результате чего образуется таутомер с переносом протона (**C**), который затем возвращается в основное состояние (**A**) с выделением тепловой энергии.

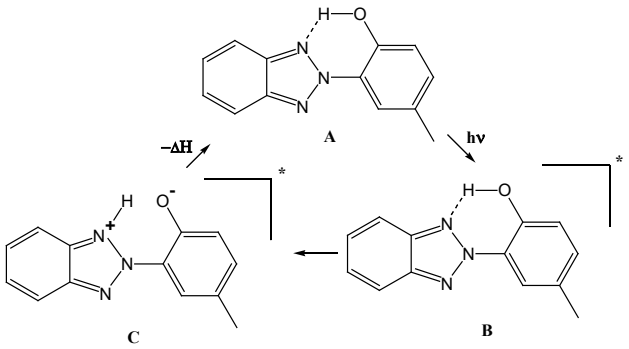


Схема 1

Следует отметить, что фотостабилизаторы, содержащие фенольный фрагмент, имеют ряд недостатков, таких как низкая эффективность в предотвращении длительного окислительного разложения и выщелачиваемость.

Схожий механизм поглощения и преобразования УФ-излучения должны иметь производные *орто*-бензотриазольные производные анилина. Наличие в *орто*-положении к бензотриазольному циклу аминогруппы способствует образованию внутримолекулярной водородной связи между аминным протоном и атомом азота бензотриазола [17]. Основной эффект такой внутримолекулярной водородной связи заключается в многократном увеличении скорости внутренней конверсии в синглетном состоянии (при 300 K). В результате большая часть энергии фотовозбуждения рассеивается термически в синглетной системе. Результирующее сокращение времени жизни

возбуждённого синглетного состояния уменьшает выход фотореакции и флуоресценции. Константа скорости фотохимической реакции остаётся неизменной [17].

Ранее нами был разработан способ совместного синтеза и разделения 1-(2-аминоарил)-1*H*- и 2-(2-аминоарил)-2*H*-бензотриазолов. Была изучена их способность поглощать УФ-излучение [18]. Оказалось, что 1-(2-аминоарил)-1*H*-бензотриазолы эффективнее поглощали ультрафиолет С, в то время как 2-(2-аминоарил)-2*H*-бензотриазолы – ультрафиолет В и А. По способности абсорбировать UVC-лучи 1-(2-аминоарил)-1*H*-бензотриазолы превосходили коммерческий светостабилизатор Tinuvin P (2-(2'-гидрокси-5'-метилфенил)бензотриазол). 2-(2-Аминоарил)-2*H*-бензотриазолы были более эффективными УФ-абсорберами, чем Tinuvin P, в средневолновой области УФ-спектра. По способности поглощать UVA-лучи 2-аминоарилзамещенные бензотриазолы демонстрировали результаты, сравнимые с Tinuvin P.

Основная часть

В продолжение ранее проведенных исследований были получены смеси 1-(2-NH_2-4-CF_3-фенил)-1*H*- (**4**) и 2-(2-NH_2-4-CF_3-фенил)-2*H*-бензотриазола (**4'**), содержащие 1- и 2-замещенные изомеры в различных соотношениях, и изучена интенсивность их УФ-абсорбции.

Цель данной работы – оценить эффективность использования смесей УФ-поглотителей по сравнению с индивидуальными N-(2-аминоарил)производными бензотриазола. Применение смесей позволит избежать достаточно сложной и трудоёмкой стадии разделения изомеров и, соответственно, исключить потери при их выделении.

Смеси изомерных аминов **4** и **4'** получали в ходе реакции ароматического нуклеофильного замещения 1*H*-бензотриазола (**1**) с 2-нитро-4-(трифторметил)-1-хлорбензолом (**2**) с последующим восстановлением изомерных нитросоединений **3** и **3'** (схема 2).

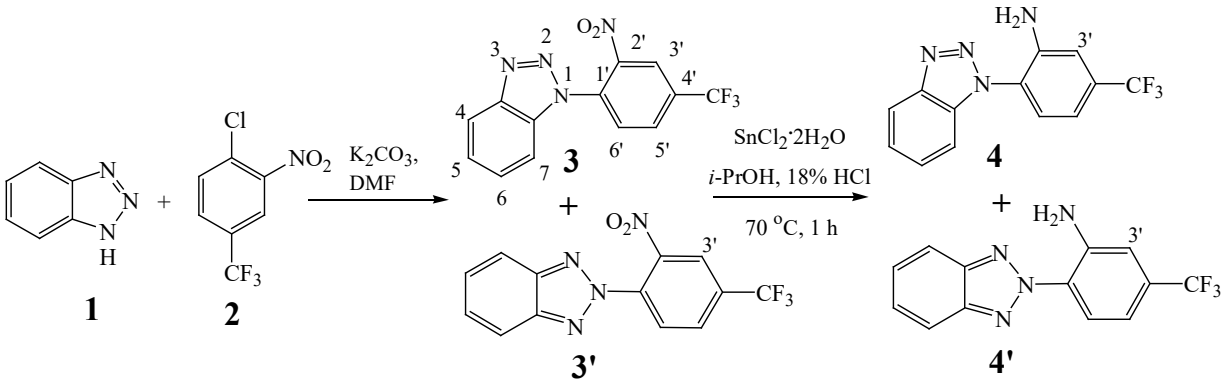


Схема 2

Для синтеза смесей, содержащих нитропродукты **3** и **3'** в различных соотношениях, реакцию S_NAr проводили в ДМФА в присутствии K_2CO_3 при различных температурах (табл. 1).

Таблица 1. Влияние температуры на соотношение **3** и **3'**, образующихся в ходе реакции S_NAr 1*H*-бензотриазола (**1**) с 2-нитро-4-(трифторметил)-1-хлорбензолом (**2**)

№	Температура, °C	Время реакции, ч	Суммарный выход, %	Соотношение* **3** и **3'**
1	40	6	92	1 : 0.50
2	50	5	94	1 : 0.46
3	60	4	93	1: 0.37
4	70	2	95	1: 0.32
5	80	1.5	97	1 : 0.26

* - согласно данным ^{1}H ЯМР спектроскопии

На рис. 2 представлен фрагмент ^{1}H ЯМР спектра смеси нитропродуктов **3** и **3'**, полученной при 40 °C. Соотношение продуктов **3** и **3'** определялось как соотношение интегрированных площадей пиков сигналов протонов 1-(2-нитроарил)- и 2-(2-нитроарил)бензотриазолов. В качестве характеристичного был выбран сигнал наименее экранированного протона $H^{3'}$ N-арильного фрагмента.

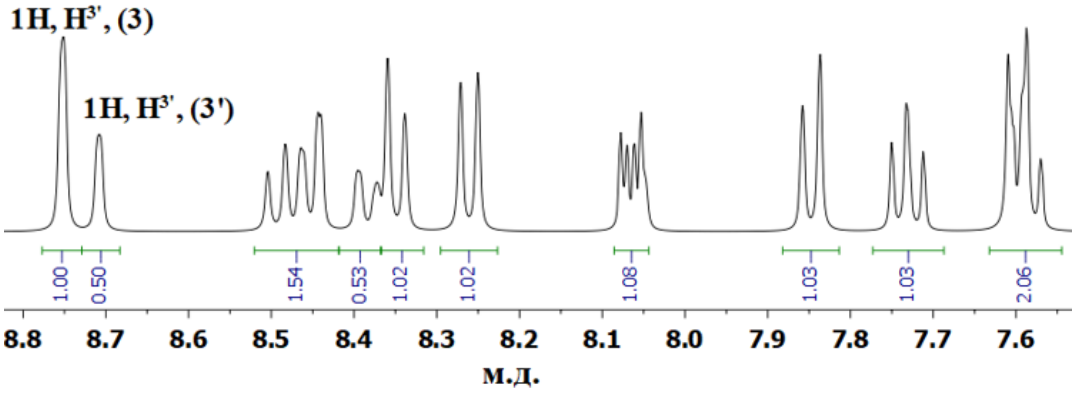


Рис. 2. Фрагмент ^{1}H ЯМР спектра смеси нитропродуктов **3** и **3'** (реакция S_NAr, 40 °C)

^{1}H ЯМР Спектры 1-[2-нитро-4-(трифторметил)фенил]-1*H*- (**3**) и 2-[2-нитро-4-(трифторметил)фенил]-2*H*-бензотриазола (**3'**), а также 1-[2-амино-4-(трифторметил)фенил]-1*H*- (**4**) и 2-[2-амино-4-(трифторметил)фенил]-2*H*-бензотриазола (**4'**), выделенных в индивидуальном виде приведены в работе [19] и в Electronic supplementary materials статьи [18].

При получении смеси 1-(2-NH_2-4-CF_3-фенил)-1*H*- и 2-(2-NH_2-4-CF_3-фенил)-2*H*-бензотриазолов (**4** и **4'**) использовались ранее предложенные нами для эффективного восстановления моно- и полинитроароматических соединений различного строения условия: $SnCl_2 \cdot H_2O$, кислая водно-спиртовая среда [20-23].

Реакцию восстановления проводили 1 ч, внося раствор восстановителя в 18% HCl в раствор смеси нитросоединений **3** и **3'** в пропан-2-оле при 70 °C (схема 2). Содержание аминопродуктов **4** и **4'** согласно данным ^{1}H ЯМР спектроскопии (рис. 3, табл. 2) в реакционной массе было примерно такое же, как и соотношение исходных нитросоединений **3** и **3'** (рис. 2) в восстанавливаемой смеси.

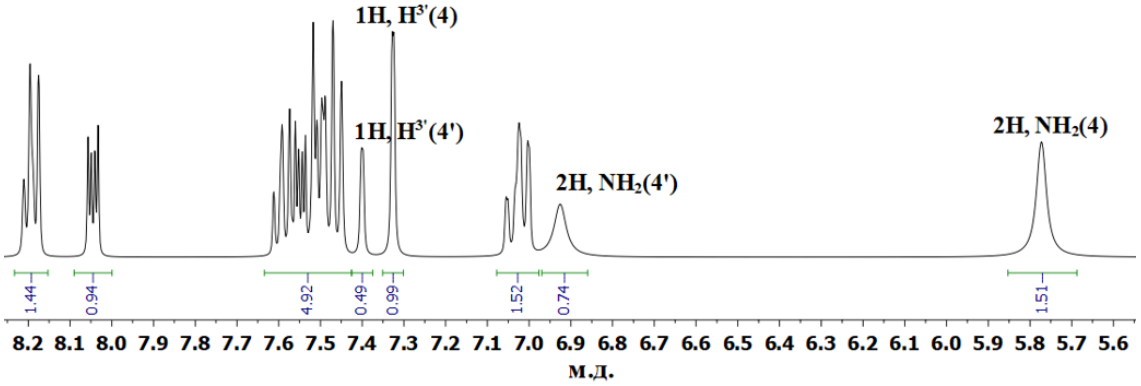


Рис. 3 Фрагмент ^{1}H ЯМР спектра смеси аминопродуктов **4** и **4'** реакции восстановления смеси нитросоединений **3** и **3'**

Таблица 2. Суммарный выход и соотношение аминосоединений **4** и **4'** в смеси, полученной при восстановлении смеси нитросоединений **3** и **3'**

№	Смесь **3** и **3'**, полученная при температуре, °C	Суммарный выход **4** и **4'**, %	Соотношение* **4** и **4'**
1	40	98	1 : 0.49 (смесь **А**)
2	50	97	1 : 0.44 (смесь **Б**)
3	60	98	1: 0.35 (смесь **В**)
4	70	99	1: 0.31 (смесь **Г**)
5	80	98	1 : 0.23 (смесь **Д**)

* - согласно данным ^{1}H ЯМР спектроскопии

Для установления перспективности использования полученных смесей аминопроизводных бензотриазола **4** и **4'** в качестве УФ-абсорберов были записаны электронные спектры поглощения в области 200-400 нм. Для сравнения применяли 1-[2-амино-4-(трифторметил)фенил]-1*H*-бензотриазол (**4**) и 2-[2-амино-4-(трифторметил)фенил]-2*H*-бензотриазол (**4'**), выделенные в индивидуальном виде. Значения коэффициентов молярной экстинкции, соответствующих максимумам поглощения в коротко-, средне- и длинноволновой области УФ-спектра, веществ **4** и **4'** и их смесей приведены в таблице 3.

Таблица 3. Интенсивность поглощения УФ-излучения 1-[2-амино-4-(трифторметил)фенил]-1*H*-бензотриазолом (**4**), 2-[2-амино-4-(трифторметил)фенил]-2*H*-бензотриазолом (**4'**) и их смесями

λ (нм)	ε, л·моль$^{-1}$·см$^{-1}$						
	Смесь **А**	Смесь **Б**	Смесь **В**	Смесь **Г**	Смесь **Д**	**4**	**4'**
280-200	32896	33219	35720	40452	42221	43590	29274
315-280	17035	15481	13379	10259	9792	6422	15213
400-315	11033	10865	9140	7893	4874	-	12817

Как видно из данных таблицы, все смеси **А-Д** аминопроизводных бензотриазола **4** и **4'** обладали абсорбцией в диапазонах 280-200 нм, 315-280 нм и 400-315 нм. С увеличением содержания в смеси 2-замещенного изомера **4'** способность поглощать UVA- и UVB-излучение усиливалась. При преобладании в смеси 1-замещенного производного **4** более интенсивно абсорбировались UVC-лучи. Следует отметить, что смеси **А** и **Б** по

сравнению с индивидуальными аминосоединениями **4** и **4'** более интенсивно поглощали средневолновое УФ-излучение. Смесь **А** аминопроизводных бензотриазола **4** и **4'** обладала сплошной интенсивной абсорбцией во всём изучаемом диапазоне УФ-спектра. По этой причине её можно рекомендовать к использованию в качестве светостабилизатора для полимерных материалов в конструкциях, эксплуатирующихся в разных слоях атмосферы, например в метеозондах и других летательных аппаратах. Если сравнивать перспективность использования полученных смесей аминопроизводных бензотриазола **4** и **4'** в качестве УФ-абсорберов с индивидуальными соединениями **4** и **4'**, то можно отметить, что применение смеси **А**, содержащей 1- и 2-(2-аминоарил)замещенные бензотриазолы в соотношении 1:0.49, экономически более выгодно. Она имела схожую с индивидуальным веществом **4'** интенсивность поглощения средне- и длинноволнового УФ-излучения, достигающего поверхности Земли и запускающего фотоокислительную деградацию полимеров. В то же время получить её значительно проще, чем индивидуальный 2-(2-аминоарил)-2*H*-бензотриазол.

Было проведено сопоставление экспериментальных электронных спектров поглощения индивидуальных соединений **4** и **4'** (рис. 4). В ближней УФ-области для изомера **4** наблюдается гипсохромный сдвиг на ~40 нм по сравнению с изомером **4'**, сопровождаемый гипохромным эффектом (снижением ε на максимуме примерно в 2 раза). Это свидетельствует о возрастании энергии электронного перехода в аминопроизводном **4**.

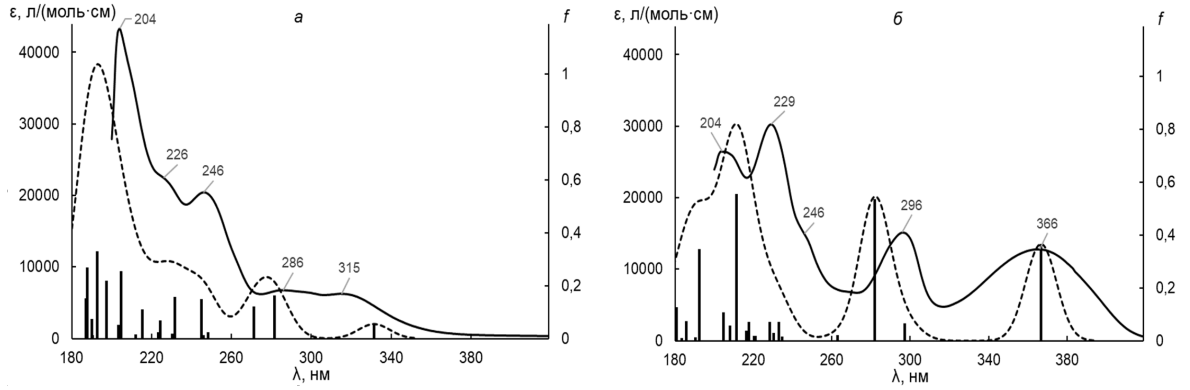


Рис. 4. Экспериментальные (—) и рассчитанные (---) электронные спектры поглощения **4** (*а*) и **4'** (*б*). Вертикальные линии – рассчитанные методом TD-DFT электронные переходы.

Для объяснения данного эффекта было проведено квантово-химическое моделирование геометрии молекул, граничных молекулярных орбиталей и электронных спектров поглощения данных веществ. Квантово-химические расчеты выполняли с использованием пакета программ ORCA версии 5.0.4 [24]. Структура молекулы **4'** близка к плоской: торсионный угол между бензимидазольным и анилиновым фрагментами равен 28°. Это обеспечивает высокую степень сопряжения между данными фрагментами. В то же время в структуре **4** торсионный угол составляет 56°, что обусловлено взаимным отталкиванием пространственно сближенных атомов водорода в положениях 7 и 6'. В результате нарушается сопряжение между бензимидазольным и анилиновым фрагментами и возрастает энергетическая щель между ВЗМО и НВМО: 4.39 эВ для **4** и 3.88 эВ для **4'**. Нарушение сопряжения наглядно можно проследить по виду граничных молекулярных орбиталей (рис. 5).

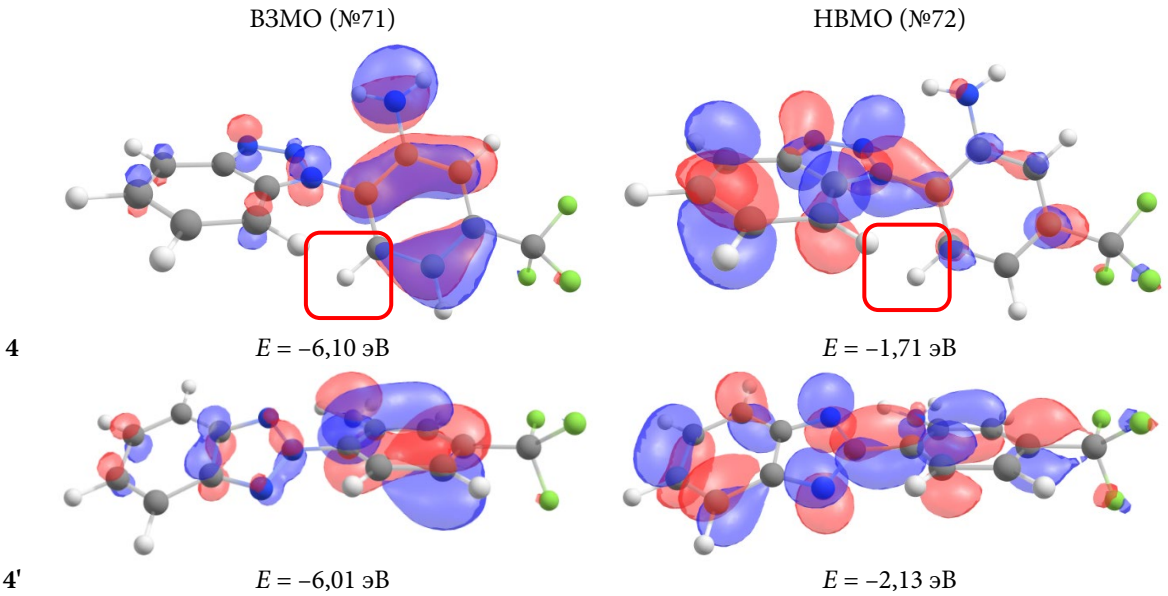


Рис. 5. Вид граничных молекулярных орбиталей соединений **4** и **4'**. Красной рамкой выделены пространственно сближенные атомы водорода в положениях 7 и 6' в соединении **4**.

ВЗМО в обеих молекулах преимущественно локализованы на анилиновом фрагменте. Вклад бензотриазольного фрагмента в ВЗМО незначителен, но в **4'** он несколько выше за счет более плоской структуры. Как следствие, энергия ВЗМО в **4'** за счет несколько большей степени сопряжения на 0.09 эВ выше, чем в **4**. В то же время НВМО молекулы **4'** является сильно делокализованной, а в **4** НВМО существенно локализована на бензотриазольном фрагменте. Нарушение сопряжения в НВМО неплоской структуры **4** приводит к существенному увеличению ее энергии (на 0.42 эВ), что является основной причиной более высокой энергии электронного перехода и гипсохромного сдвига в ближней УФ-области спектра для молекулы **4**.

Рассчитанные методом TD-DFT электронные спектры поглощения хорошо согласуются с экспериментальными (рис. 4). Расчётные спектры построены с использованием программы Chemcraft (см. экспериментальную часть). Несмотря на отдельные расхождения положений расчетных и экспериментальных максимумов поглощения на 10-15 нм, расчетные спектры хорошо передают основные закономерности экспериментальных спектров:

- положение основных максимумов поглощения, в том числе и неразрешенных пиков (226 нм для **4** и 246 нм для **4'**);

- гипсохромный сдвиг максимумов поглощения для **4** по сравнению с **4'**;

- относительную интенсивность максимумов поглощения (достаточно высокая в областях УФ-А, УФ-В для **4'** и низкая для **4**).

Таким образом, квантово-химическое моделирование является достаточно хорошим инструментом предсказания электронных спектров поглощения и оценки предполагаемой интенсивности абсорбционной способности синтезируемых светостабилизаторов.

Для дополнительного доказательства влияния конформационных эффектов было проведено квантовохимическое моделирование плоской структуры **4** (торсионный угол между бензимидазольным и анилиновым фрагментами принудительно задан равным 0°).

В НВМО полученной структуры, как и в **4'**, наблюдается большая степень сопряжения между бензотриазольным и анилиновым фрагментами. Энергетическая щель между ВЗМО и НВМО для плоской структуры **4** составляет 3.89 эВ, т.е. сопоставима с неплоской структурой **4**. Несмотря на это, расчётное значение первого максимума поглощения для плоской структуры **4** равно 360 нм (энергия перехода 3.44 эВ), т.е. близко к таковому для структуры **4'**. По-видимому, это объясняется большей релаксацией молекулярных орбиталей при образовании первого электронного возбужденного состояния для плоской структуры **4**. Таким образом, если бы молекула **4** имела плоскую структуру, она бы поглощала примерно в тех же областях, что и структура **4'**. Но стерическое отталкивание между атомами водорода в положениях 7 и 6' делает плоскую структуру **4** на 24.7 кДж/моль энергетически невыгодной по сравнению с неплоской, что подтверждает определяющую роль стерических факторов в положении максимумов поглощения.

Экспериментальная часть

Спектры ЯМР регистрировали на приборе «Bruker DRX-400» для растворов ДМСО-d_6. В качестве эталона для отсчёта химических сдвигов использовали сигналы остаточных протонов растворителя в ^{1}H ЯМР δ 2.5 м.д.

Методика совместного синтеза 1-[2-нитро-4-(трифторметил)фенил]-1*H*- (3) и 2-[2-нитро-4-(трифторметил)фенил]-2*H*-бензотриазола (3')

Для получения смеси изомеров **3**/**3'** в различных соотношениях реакционную массу, содержащую 0.044 моль 1*H*-бензотриазола (**1**), 0.063 моль безводного K_2CO_3 и 0.042 моль 2-нитро-4-(трифторметил)-1-хлорбензола (**2**) нагревали в ДМФА (1) при 40 °С 6 ч, (2) при 50 °С 5 ч, (3) при 60 °С 4 ч, (4) при 70 °С 4 ч и (5) при 80 °С 1.5 ч. Затем реакционную массу охлаждали и выливали в воду. Выпавший осадок отфильтровывали, несколько раз промывали водой и сушили. Полученную смесь растворяли в ацетоне и отделяли от механических примесей. После упаривания ацетона получали смеси изомерных нитропродуктов с суммарным выходом 92-97%.

Методика совместного синтеза 1-[2-амино-4-(трифторметил)фенил]-1*H*- (4) и 2-[2-амино-4-(трифторметил)фенил]-2*H*-бензотриазола (4')

К 0.038 моль раствору смеси изомеров **3** и **3'** в 100 мл *i*-PrOH при 70 °С при перемешивании вносили раствор 0.133 моль $SnCl_2{\cdot}2H_2O$ в 50 мл 18% HCl. Через 0.5 ч *i*-PrOH упаривали. После этого реакционную массу охлаждали, обрабатывали NH_4OH до pH=8 и экстрагировали горячим хлороформом (Σ=250 мл). После отгонки хлороформа получали сухую смесь изомерных аминопродуктов **4** и **4'**.

Методика приготовления растворов исследуемых образцов для УФ-спектроскопии.

Навеску образца 0.005-0.007 г растворяли в 25 мл пропан-2-ола. Затем 0.2 мл полученного раствора разбавляли 10 мл пропан-2-ола.

Методика записи спектров на спектрофотометре Perkin Elmer Lambda 35.

В одну кювету вносили изопропанол. Для компенсации пиков поглощения примесей в спирте записывали спектр-калибровку. Далее по очереди записывали спектры исследуемых образцов.

Коэффициенты молярной экстинкции рассчитывали по формуле: $\varepsilon=D/C\cdot l$, где D – оптическая плотность, C – концентрация раствора, l – длина кюветы (l=1 см).

Методика проведения квантово-химических расчетов

Квантово-химические расчеты выполняли с использованием пакета программ ORCA версии 5.0.4 [24]. Оптимизацию геометрии изомеров проводили методом r^2SCAN-3c [25] с расчетом частот колебаний для подтверждения достижения минимума на поверхности потенциальной энергии. Для оптимизации геометрии выполняли одноточечный расчет и расчет электронных переходов методом время-зависимой теории функционала плотности (TD-DFT) [26] с применением гибридного функционала B3LYP [27] с базисным набором def2-TZVP [28]. Рассчитано 20 низколежащих синглетных возбужденных состояний. Дисперсионная поправка D3 по Гримме [29] учтена для корректного описания невалентных взаимодействий. Учет влияния среды (пропан-2-ол) производили в рамках модели поляризованного континуума CPCM [30]. Визуализацию структур, молекулярных орбиталей и рассчитанных электронных спектров поглощения проводили в программе Chemcraft [31]. Профиль кривых спектров построен с применением функции распределения Гаусса (полуширина линии 18 нм).

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

Список источников

1. **Lu T., Solis-Ramos E., Yi Y., Kumosa M.** UV degradation model for polymers and polymer matrix composites. *Pol. Deg. and Stab.,* 2018, 154, 203-210. DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2018.06.004.
2. **Wypych G.** Handbook of UV degradation and stabilization. Elsevier, 2020, 518 p. URL: www.sciencedirect.com/book/9781927885574/handbook-of-uv-degradation-and-stabilization.
3. **Rabek J. F.** Polymer photodegradation: mechanisms and experimental methods. Springer Science & Business Media, 2012, 664 p. URL: https://link.springer.com/book/10.1007/978-94-011-1274-1.
4. **Bisht P**., **Pandey K.K**., **Barshilia H.C**. Photostable transparent wood composite functionalized with an UV-absorber. *Polym. Degrad. Stab.,* 2021, 189, Article 109600. DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2021.109600.
5. **Cormack P.A.G**., **Erdemli O.C**., **Sankey S.W**. Polymerizable UV absorbers for the UV stabilization of polyesters. I. Design, synthesis and polymerization of a library of UV absorbing monomers. *Arkivoc*, 2021, 6. 148-173. DOI: 10.24820/ark.5550190.p011.575.
6. **Zhang Y**., **Naebe M**. Lignin: A review on structure, properties, and applications as a light-colored UV absorber. *ACS Sustainable Chem. Eng.,* 2021, 9(**4**), 1427-1442. DOI: 10.1021/acssuschemeng.0c06998.
7. **El-Hiti G.A**., **Ahmed D.S**., **Yousif E**., **Al-Khazrajy O.S**., **Abdallh M**., **Alanazi S.A**. Modifications of polymers through the addition of ultraviolet absorbers to reduce the aging effect of accelerated and natural irradiation. *Polymers*, 2021, 14(**1**), 20. DOI: https://doi.org/10.3390/polym14010020.
8. **Лефедова О.В., Немцева М.П.** Жидкофазная гидрогенизация 2-нитро-2'-гидрокси-5'-метилазобензола на скелетном никеле с целью получения фотостабилизирующей композиции. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*, 2025, 68(**9**), 106-114. DOI: 10.6060/ivkkt.20256809.7267
   Lefedova O.V., Nemtzeva M.P. Liquid-phase hydrogenation of 2-nitro-2'-hydroxy-5'-methylazobenzene on skeletal nickel to obtain a photo-stabilizing composition. *ChemChemTech,* 2025, 68(**9**), 106-114. DOI: 10.6060/ivkkt.20256809.7267.

9. **Лефедова О.В., Немцева М.П.** 2-2'-Гидрокси-5'-метилфенилбензотриазол и продукты его гидрогенизации в стабилизации полистирола. *Ж. прикл. химии.,* 2012, 85(**7**), 1163-1167.
   Lefedova O.V., Nemtseva M.P. 2-(2-Hydroxy-5-methylphenyl)benzotriazole and Its Hydrogenation Products in Polystyrene Stabilization. *Russ. J. Appl. Chem.,* 2012, 85(**7**), 1128-1132. DOI: 10.1134/S1070427212070245
10. **Cui Z., Li X., Wang X., Pei K., Chen W.** Structure and properties of N-heterocycle-containing benzotriazoles as UV absorbers. *J. Mol. Struct*., 2013, 1054, 94-99. DOI: 10.1016/j.molstruc.2013.09.045.
11. **Pijeau S., Foster D., Hohenstein E.G.** Excited-state dynamics of a benzotriazole photostabilizer: 2-(2′-hydroxy-5′-methylphenyl)benzotriazole. *J. Phys. Chem. A.,* 2017, 121(34), 6377-6387. DOI: 10.1021/acs.jpca.7b04504.
12. **Kim S., Hwang T.G., Namgoong J.W., Kim H.M., Kim P.J.** Effect of linker moiety on linear dimeric benzotriazole derivatives as highly stable UV absorber for transparent polyimide film. *Dyes Pigm.,* 2020, 180, Article 108469. DOI: 10.1016/j.dyepig.2020.108469.
13. **Naumov S.**, **Herzog B.**, **Abel B.** Spectra and photorelaxation of hydroxyphenyl-benzotriazole-type UV absorbers: From monomers to nanoparticles. *J. Phys. Chem. A*., 2020, 124(**4**). 625-632. DOI: 10.1021/acs.jpca.9b09883.
14. **Wu F., Tan S., Fang Z., Deng J., He Z., Huang C., Au C., Yi B.** Substituent Effects on the Ultraviolet Absorption Properties of 2,4-Dihydroxy Dibenzophenone. *Molecules*, 2022, 27(**23**), Article 8169. DOI: 10.3390/molecules27238169
15. **Huang Z., Ding A., Guo H., Lu G., Huang X.** Construction of nontoxic polymeric UV-absorber with great resistance to UV-photoaging. *Sc. Rep*., 2016, 6(1), 1-12. DOI: 10.1038/srep25508.
16. **Pospíšil J., Nešpurek S.** Photostabilization of coatings. Mechanisms and performance. *Prog. Polym. Sci.,* 2000, 25(**9**). P. 1261–1335 DOI: 10.1016/S0079-6700(00)00029-0.
17. **Merrill J.R., Bennett R.G.** Influence of Intramolecular Hydrogen Bonding on Electronic De-excitation in Amidophenylbenzotriazoles. *J. Chem. Phys*., 1965, 43(4), 1410-1414. DOI: 10.1063/1.1696934.
18. **Бегунов Р.С., Хлопотинин А.И., Лобанова Л.В., Воронцов С.М., Савина Л.И., Данилова А.С.** Новые УФ поглотители на основе N-(2-аминоарил)бензотриазолов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология,* 2024, 67(**11**), 86-94. DOI: 10.6060/ivkkt.20246711.7070.
    Begunov R.S., Khlopotinin A.I., Lobanova L.V., Vorontsov S.M., Savina L.I., Danilova A.S. New UV absorbers based on N-(2-aminoaryl)benzotriazoles. *ChemChemTech,* 2024, 67(**11**), 86-94. DOI: 10.6060/ivkkt.20246711.7070.
19. **Хлопотинин А.И.** Синтез, функционализация и свойства N-(2-аминоарил)бензотриазолов, дис. канд. хим. наук. М., 2026, 137 с.
20. **Бегунов Р.С., Орлов В.Ю., Копейкин В.В.** Влияние природы растворителя на ориентацию моновосстановления однозамещенных 2,4-динитробензолов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*, 1998, 41(5), 9-11.
    Begunov R.S., Orlov V.Yu., Kopeikin V.V. Vliyanie prirody rastvoritelya na orientatsiyu monovosstanovleniya odnozameshchennykh 2,4-dinitrobenzolov. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.*, 1998, 41(5), 9-11 (in Russian)
21. **Rusanov A.L., Komarova L.G., Prigozhina M.P., Begunov R.S., Yakovleva Y.S.** Benzophenone-type unsymmetrical substituted aromatic diamines and organosoluble polyimides therefrom. *High Perform. Polym.,* 2009, 21(6), 729-743. DOI: 10.1177/0954008308099187
22. **Бегунов Р.С., Валяева А.Н., Башкирова А.А., Беломоина Н.М., Булычева Е.Г.** Эффективный способ синтеза полиядерных тетрааминов - мономеров для полигетероариленов. *Изв. АН. Сер. хим.,* 2018, 6, 1072-1077.
    Begunov R.S., Valyaeva A.N., Bashkirova A.A., Belomoina N.M., Bulycheva E.G. An effective synthesis of polynuclear tetraamines, monomers for polyheteroarylenes. *Russ. Chem. Bull.,* 2018, 67(**6**), 1072-1077. DOI: 10.1007/s11172-018-2182-8
23. **Богданова Д.М., Савина Л.И., Бегунов Р.С.** Синтез и функционализация аминопроизводных пиридо[1,2-*a*]бензимидазола. *От химии к технологии шаг за шагом*, 2022, 3(**4**), 30-38. URL: http://chemintech.ru/index.php/tor/2022-3-4 (дата обращения 23.07.2026)

Bogdanova D.M., Savina L.I. Begunov R.S. Synthesis and functionalization of pyrido[1,2-a]benzimidazole amino derivatives. *From Chemistry Towards Technology Step-By-Step*, 2022, 3(**4**), 80-87 [online]. Available at: http://chemintech.ru/index.php/tor/2022-3-4 (дата обращения 23.07.2026)

24. **Neese F.** Software update: The ORCA program system –Version 5.0. *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.*, 2022, 12(**5**), e1606. DOI: 10.1002/wcms.1606
25. **Grimme S., Hansen A., Ehlert S., Mewes J.-M.** r^2SCAN-3c: A "Swiss army knife" composite electronic-structure method. *J. Chem. Phys.*, 2021, 154(**6**), 064103. DOI: 10.1063/5.0040021
26. **Stephens P.J., Devlin F.J., Chabalowski C.F., Frisch M.J.** Ab initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields. *J. Phys. Chem.*, 1994, 98(**45**), 11623-11627. DOI: 10.1021/j100096a001
27. **Lee C., Yang W., Parr R.G.** Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Phys. Rev. B.*, 1988, 37(**2**), 785-789. DOI: 10.1103/PhysRevB.37.785
28. **Weigend F., Ahlrichs R.** Balanced basis sets of split valence, triple zeta valence and quadruple zeta valence quality for H to Rn: Design and assessment of accuracy. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2005, 7(**18**), 3297-3305. DOI: 10.1039/b508541a
29. **Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H.** A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *J. Chem. Phys.*, 2010, 132(**15**), 154104. DOI: 10.1063/1.3382344
30. **Barone V., Cossi M.** Quantum calculation of molecular energies and energy gradients in solution by a conductor solvent model. *J. Phys. Chem. A*., 1998, 102(**11**), 1995-2001. DOI: 10.1021/jp9716997
31. Chemcraft – graphical software for visualization of quantum chemistry computations. Version 1.8, build 682. https://www.chemcraftprog.com

Поступила в редакцию 08.06.2026
Одобрена после рецензирования 01.07.2026
Принята к опубликованию 12.08.2026