

தலையாங்கம்

- அழகு தமிழில் அதிநவீன அறிவியல் 5
முனைவர் மா. சீனிவாசன்

சிறப்புக் கட்டுரை

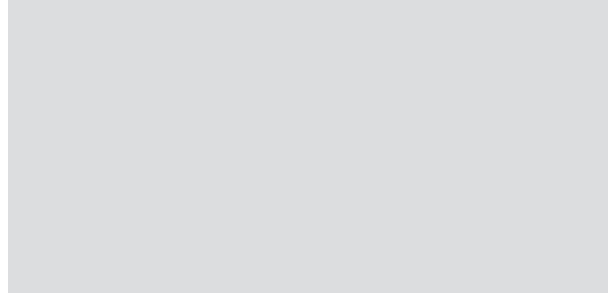
- மகாதேவ சுப்ரமணிய மணி 5
செந்தில்குமார் சந்திரன், க.அஜய் ஜவகர், பெ.இராசாமி

ஆய்வுக் கட்டுரைகள்

- உயிரி உணர்வீக்களின் போக்குகள் மற்றும் சுகாதாரத்துறையில் அவற்றின் பயன்பாடுகள் 9
முனைவர் தாமோதரன் நெடுமாறன்
- சாய-உணர்ச்சிப்பாடுடைய சூரிய மின்கலன்களின் உணர்திறன் பயன்பாட்டிற்காக 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொம்பீ - ஈனோய்க் அமிலத்தின் தயாரிப்பு மற்றும் பண்புகள் 27
கோட்டீஸ்வரன் சண்முகம், மு.செந்தில்பாண்டியன், பெ.இராமசாமி
- பகுதி கரிம மைய சீரான நேர்ச்சார்பிலா 4-டை மெதிலின் அமைன் பிரிடினல் பொட்டாசியம் குளோரைடு படிகத்தின் செயல்முறை வளர்ப்பு மற்றும் பண்பறிதல் 44
ஜே. ஜான்சன், ஆர்.சீனிவாசன், டி.சிவாவிஷ்ணு
- (2E) - 3-(4-(4-மெத்தோ கார்ட்டிஸ்டரினல்) பினைல்) - 2 - சனோனோராரிலிக் சாய உணர்ச்சி திறன் சூரிய மின்கலத்தின் செயல்திறனை அமிலத்தின் DFT மற்றும் TD-DFT பயன்படுத்தி மேம்படுத்துதல் 60
மு. அர்ஜன்குமார், இ.ராகவன், மா.பிரகாசம்

பொதுக் கட்டுரை

- அறிவியல் கலைச்சொற்கள் 73
பொ. ஜெகதீஸ்வரன், வி. நடராஜன்

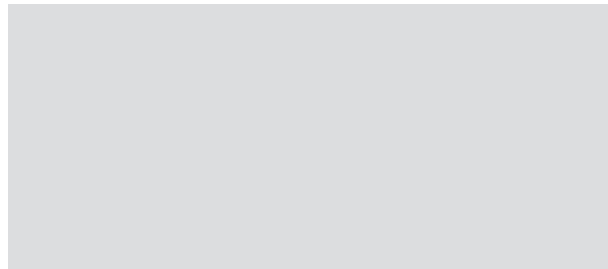


பிறநாட்டு நல்லறிஞர் சாத்திரங்கள்
தமிழ்மொழியிற் பெயர்த்தல் வேண்டும்
இறவாத புகழுடைய புதுநூல்கள்
தமிழ்மொழியில் இயற்றல் வேண்டும்
மறைவாக நமக்குள்ளே பழங் கதைகள்
சொல்வதிலோர் மகிமை இல்லை
திறமான புலமையெனில் வெளி நாட்டோர்
அதைவணக்கஞ் செய்தல் வேண்டும்.

– மகாகவி பாரதியார்

அணுவைப் பிளந்து ஏழ்கடலைப் புகுத்தி
குறுகத் தரித்த குறள்.

– ஓளவையார்



அடித தமிழில் அதிநவீன அறிவியல்!

முனைவர். மா. சீனிவாசன்
நிர்வாக ஆசிரியர்

இனிய வணக்கம்!

தாய்மொழி வழி அறிவியல் ஆராய்ச்சி என்ற நமது ஏக்கம், தாகம், கனவு அனைத்தும் இந்த சஞ்சிகை ஆரம்பித்து ஓராண்டு வெற்றிகரமாக வெளிவந்ததன் மூலம் சிறிதளவு நிறைவேறி இருக்கிறது. ஆனாலும் போதுமான அளவு நவீன அறிவியலுக்கு ஏற்ற தமிழ் கலைச் சொற்கள் இல்லாத காரணத்தால், ஆங்கில வழி ஆய்வு கட்டுரைகளை மொழிபெயர்த்து தமிழாக்கம் செய்யும் எங்களது இந்-தப்பணி தாய்மொழி வழி ஆராய்ச்சி என்ற முழுக்கத்திற்கு உதவாது என்பதை நினைவில் கொள்கின்றோம்.

ஆம்! எப்பொழுது ஆய்வாளர்கள் தாய்மொழியிலே தங்களது ஆராய்ச்சி கட்டுரைகளை எழுதி அவற்றை ஆங்கிலத்தில் மொழிபெயர்க்கின்றனரோ அப்பொழுது தான், நமது உண்மையான ஆய்வு சார்ந்த மனித ஆற்றலின் வலிமை, ஜப்பான், ஜெர்மனி போன்ற நாடுகளில் செழித்து வளரும் புதிய தொழில்நுட்பங்களை போன்று நமது நாட்டிலும் புதிய தொழில்நுட்பத்தின் கண்டுபிடிப்பிற்கான விழு-துகளாக வளரும். அப்படி அல்லாமல் அடிப்படை அறிவியலும் அது சார்ந்த புரிதலும் இல்லாமல் இளம் ஆய்வாளர்கள் தங்களது முனைவற்றபட்டதிற்காக அங்கும் இங்கும் சில ஆங்கில வழி வெளிவந்த மற்றநாட்டு ஆய்வாளர்களின் ஆய்வு கட்டுரைகளை பதிவிறக்கம் செய்து அவற்றை நாம் எழுதும் கட்டுரையில் வெட்டி, ஒட்டி, திருத்தம் (CUT and COPY, EDIT) செய்து தங்களது ஆய்வு கட்டுரைகளை பதிப்பிக்கும் பொழுது அதன் பயன், பயிர் இல்லாத நிலத்திற்கு பாயுச்சம் தண்ணீர் போன்று வீணற்று போகும்.

கலைக்கதிர் போன்ற மிக சில இதழ்கள் வெகுஜன மக்களுக்கும், பள்ளி சிறுவர்களுக்கும் ஏற்ற அறிவியலை கொண்டுவருவதில் பெயரளவிற்கு வெற்றிகண்டனர். ஆனால் இது போன்ற இதழ்களை வாங்கிபடிக்கும் மாணவர்கள், ஆசிரியர்கள், மற்றும் அறிவியல் ஆர்வமுள்ள நண்பர்கள் அவ்வி-தழ்களின் வாசகர்களாக மாற தவறி விட்டனர். அதே போன்ற நிலை தான் இந்த “அறிவியல் மற்றும் தொழில்நுட்ப ஆராய்ச்சி சஞ்சிகை”க்கும் ஏற்படுமோ என்று நினைக்கும் பொழுது மிக வருத்தமும் வலியும் மட்டுமே மிஞ்சுகிறது. அடுத்த இதழ் எப்பொழுது வருமோ என்ற ஏக்கம்தான் ஒரு வாசக-னுக்கான மனநிலை. ஆனால் துர்திஷ்டவசமாக இது போன்ற அறிவியல் இதழ்களுக்கு கவர்ச்சியான விளம்பரமோ, மேம்போக்கான ஈர்ப்போ ஏற்படும் சூழல் நிலவுவது இல்லை. காரணம், இன்றைய அவசர உலகில் சிந்திக்க நேரமற்று, தங்களது அளவுகடந்த ஆற்றலின் அற்புதம் என்னவென்று புரிந்து சிந்-தனையை சிறப்பான படைப்பாக்கம் செய்ய முயலும் ஆய்வாளர்கள் வெகு சிலரே! கிராமிய சூழலில் இருந்து வரும் பல தமிழக இளம் ஆய்வாளர்கள் தங்களுடைய துறை சார்ந்த அறியாமைக்கு அந்நிய மொழியை காரணம் காட்டுகின்றனர். அவர்களுக்காகவே பல பல்கலைக்கழக மற்றும் கல்லூரி பேராசிரியர்கள் இணைந்து சிரத்தையுடன், பல கடினமான சூழலில் கொண்டுவரும் இவ்விதழின் பயன் இதன் நோக்கத்தை சிறிதளவாவது பூர்த்தி செய்யும் பட்சதில், நிச்சியம் மென்மேலும் எதிர்வரும் காலத்தில் மேலும் சிறப்பாக வெளிக்கொண்டுவர முயற்சிப்போம்.

“புரிதலுடன் கூடிய அறிவே படைப்பாக்கத்தின் அடிப்படை விதி!!!

தாய்மொழி வழி அறிதலே முழுமையான புரிதலுக்கான சிறந்த வழி!”

வாழ்க அறிவியல்! வளர்க தாய்மொழிவழி ஆராய்ச்சி!

மகாதேவ சுப்ரமணிய மணி



செந்தில்குமார் சந்திரன், க. அஜய் ஜவகர், பெ. இராமசாமி

எஸ்.எஸ்.என் பொறியியல் கல்லூரி, காலவாக்கம், சென்னை-603110

ஆரம்ப வாழ்க்கை

மஹாதேவ சுப்ரமணிய மணி ஒரு இந்திய பூச்சியியலாளர். மேலும் இவர் அதி உயர் பூச்சியியல் துறையின் மூலம் பிரபலமடைந்தார். அவர் மார்ச் 2, 1908 ஆம் ஆண்டு தமிழ் நாட்டிலுள்ள தஞ்சாவூரில் பிறந்தார். ஆரம்ப பள்ளிப் பதிவுகள் மற்றும் சென்னை பல்கலைக்கழக எம்.ஏ படிப்பின் சான்றிதழ் படி அவருடைய இயற்பெயர் எம்.சுப்ரமணிய மணி எனவும் பின்னர், சிறிது கால சேவையின் போது அவர் மஹாதேவ சுப்ரமணிய மணி என்ற எம்.எஸ். மணி எனவும் அடையாளம் காணப்பட்டார்.

கல்வி மற்றும் பணிகள்

மஹாதேவ சுப்ரமணிய மணி, கோயம்புத்தூர் அரசு கல்லூரியில், 1928 ஆம் ஆண்டில் இடைநிலைப் பரீட்சையில் தேர்ச்சி பெற்றார் பிறகு மருத்துவ படிப்பை சென்னை மருத்துவக் கல்லூரியில் ஒரு வருடம் வரை பயின்று 1929 ஆம் ஆண்டில், நிதி நெருக்கடியால் மருத்துவப் படிப்பை கைவிட்டார். பின் 1933 ஆம் ஆண்டு வேலைத்தேடி கல்கத்தாவிற்குச் சென்றார். அங்கு அவர் சல்டாஹ்வில் பாங்காபாசி கல்லூரியில் பகுதி நேர செய்முறையாளராகவும் மற்றும் இயற்பியல் ஆசிரியராகவும் பணியாற்றினார். இந்த காலகட்டத்தில் அவர் பூச்சி நிறமாக்கல் மூலம் சர்.சி.வி.ராமனுக்கு உதவி புரிந்தார். மேலும் இந்திய அருங்காட்சியகத்தில் பணிப்புரிந்ததுடன் கல்கத்தாவிலுள்ள இந்திய

விலங்கியல் ஆய்வு மையத்தில் கௌரவ ஆராய்ச்சி மாணவராகவும் பணியாற்றினார். பின்னர் 1937 ஆம் ஆண்டில் தில்லியிலுள்ள புசாவில் அரசுக்குரிய வேளாண் ஆராய்ச்சி நிறுவனத்தில் பூச்சியியல் துறையில் ஆராய்ச்சி உதவியாளராக சேர்ந்தார். இங்கு இவருக்கு முனைவர் ஹேம் சிங் ப்ருதி மற்றும் முனைவர் பீர்பால் சஹ்னி ஆகியோருடன் இணைந்து பணியாற்றும் வாய்ப்புக்கிட்டியது. இவரது ஆராய்ச்சியின் முக்கிய பணியை அங்கீகரிப்பதற்காக இவர்கள் எம்.எஸ். மணியனை இங்கிலாந்தின் அரசு குழுவின் உறுப்பினராவதற்கு முன்மொழிந்தனர். இவர் சென்னை பல்கலைக்கழகத்தில் 1937 ஆம் ஆண்டு பூச்சியியல் துறையில் சில ஆராய்ச்சி தொகுப்புகளை வெளியிட்டதால் இவருக்கு எம்.ஏ பட்டம் வழங்கப்பட்டது.

அவர் இளைநிலை பதவியில் இருந்தபோது பதவி உயர்வு மறுக்கப்பட்டது. எனவே அவர் தனது எதிர்கால பணியின் காரணமாக 1944 இல் தனது பணியை ராஜினாமா செய்து வேறு இடத்தை தேர்ந்தெடுக்கலாயினார். இதனால் அவர் சிறிது காலத்திற்கு வேலையற்று இருந்தார். பின் இவர் ஒரு மொழிப்பெயர்ப்பாளராக தனது பணியைத் தொடர்ந்தார். மேலும் இரண்டாம் உலகப்போரின்போது புதுதில்லியிலுள்ள இராணுவத் தணிக்கைப்பிரிவில் ஜெர்மன் மொழி மொழிப்பெயர்ப்பாளராகவும் விளங்கினார். பிரிட்டிஷ்-இந்திய இராணுவத்திற்கு ஜெர்மனி

யிலிருந்து கைப்பற்றப்பட்ட 'உத்தியோகபூர்வ' ஆவணங்களை மொழிபெயர்ப்பதே அவரது வேலையாக இருந்தது. அவர் பெர்லினிலிருந்து வரும் வானொலி ஒலிப்பரப்புகளை கண்காணித்து அவற்றை ஆங்கிலத்தில் மொழிபெயர்த்து வழங்குவார். மேலும் அவர் ஜெர்மன் தொழில்நுட்ப பத்திரிகைகள் மற்றும் விஞ்ஞான அறிக்கைகள் ஆகியவற்றை மொழிபெயர்த்தார்.

1945 ஆம் ஆண்டில் அவர் தில்லிக்குச் சென்று ஆக்ராவின் செயின்ட் ஜான்ஸ் கல்லூரியில் உயிரியல் துறையின் விரிவுரையாளராக சேர்ந்தார். இவர் பூச்சியியல் பற்றிய முற்போக்கான அடிப்படை ஆராய்ச்சிகளின் மூலம் பல்கலைக்கழக மானிய ஆணையத்திடமிருந்தும் மற்றும் முனைவர் ராதாகிருஷ்ணன், ஜாகீர் ஹுசைன் போன்ற சிறந்த தலைவர்களிடமிருந்தும் ஆதரவைப் பெற்றிருந்தார். இங்கிருந்து கொண்டே அவர் இமயமலையில் பல விஞ்ஞான ஆராய்ச்சிகளை மேற்கொண்டிருந்தார். 1947 ஆம் ஆண்டு, பன்னிரெண்டு தொகுதிகளில் ஆய்வு அறிக்கைகளை சமர்ப்பித்த காரணத்திற்காக, ஆக்ரா பல்கலைக்கழகம் இவருக்கு அறிவியல் முனைவர் பட்டத்தை வழங்கியது.

மஹாதேவ சுப்ரமணிய மணி 1950 ஆம் ஆண்டில் முதன்முதலாக பூச்சியியல் பள்ளி ஒன்றை நிறுவினார். பின்னர் அவர் உயிரியல் மற்றும் பூச்சியியல் ஆகிய துறைகளில் பேராசிரியராகவும் விலங்கியல் துறைத் தலைவராகவும் நியமிக்கப்பட்டார். 1956 ஆம் ஆண்டு, இந்தியாவின் விலங்கியல் ஆய்வு துறையில் துணை இயக்குநராக சேர்ந்தார். பின் 1968 இல் ஓய்வு பெற்றார். ஓய்வு பெற்ற பின் அவர் ஆக்ராவில் உள்ள செயின்ட் ஜான்ஸ் கல்லூரியில் பூச்சியியல் துறை பேராசிரியராக சேர்ந்தார். அங்கு 1984 ஆம் ஆண்டு வரை அவர் அவரது ஆராய்ச்சி பணியைத் தொடர்ந்தார். பின்னர் அங்கிருந்து சென்னைக்கு திரும்பி இந்திய விலங்கியல் ஆய்வு துறையில் பணி புரிந்தார். 1990 ஆம் ஆண்டில் அவர் சென்னை மாநில கல்லூரியிலுள்ள தாவர வியல் திணைக்களத்தின் ஓய்வு பெற்ற பேராசிரியராகவும் முனைவர் பட்டம் பயிலும் மாணவர்களுக்கு ஒரு வழிகாட்டியாகவும் தனது பணியைத் தொடர்ந்தார்.

2002 ஆம் ஆண்டில் ஹைதராபாத்துக்குச்

சென்று அவரது மூத்த சகோதரி ஜானகியின் பேரன் ஜியோதீர்மே ஷர்மாவுடன் இணைந்து பணிப்புரிந்தார். ஜியோதீர்மே ஷர்மா ஹைதராபாத் டைம்ஸ் ஆஃப் இந்தியா இதழின் பதிப்பாசிரியர் என்பது குறிப்பிடத்தக்கது. பின் செப்டம்பர் 2002 இல், பெங்களூருக்கு சென்று தனது ஒரே மகனான திருமதி. பிரேமா சுப்பிரமணியன் மற்றும் அவரது கணவர் வி.எஸ். சுப்ரமணியன் ஆகியோருடன் வசித்து வந்தார். 8 ஜனவரி 2003 இல், மஹாதேவ சுப்ரமணிய மணி தனது 94 வயதில் இயற்கை எய்தினார்.

அறிவியல் படைப்புகள் மற்றும் பங்களிப்புகள்

அவர் ஜெர்மானிய மொழியிலும், சமஸ்கிருதத்திலும் சரளமாக பேசுவதிலும் எழுதுவதிலும் திறமை பெற்றிருந்தார். அதுபோலவே டச்சு, பிரெஞ்சு மற்றும் ரஷ்ய மொழிகளில் ஆழமான ஆர்வத்தையும் கொண்டிருந்தார். அவர் 250க்கும் மேற்பட்ட ஆராய்ச்சித் தொகுப்புகளையும், 34 பாடநூல்களில் தாவர மண்டலங்களின் சூழலியல் மற்றும் அதிநவீன பூச்சியியல் அறிமுகம் ஆகியவற்றையும் வெளியிட்டார். அதிநவீன பூச்சியியல் துறையில் முன்னோடியான பணியின் மூலம் அவர் மிகவும் நினைவுப்படுத்தப்படுகிறார். அவர் 1954, 1955 மற்றும் 1956 ஆம் ஆண்டுகளில் வட மேற்கு இமய மலையில் நடந்த மிகப்பெரிய பூச்சியியல் பயணத்திற்கு தலைமை வகித்தார்.

அவர் அதி உயர் பூச்சியியல், சூழலியல் மற்றும் இந்தியாவின் உயிரியல் ஆய்வு போன்ற பல புத்தகங்களை வெளியிட்டார். 1963 இல் சோவியத் ஒன்றியத்தின் ஆராய்ச்சி திட்டம் ஒன்றை செயல்படுத்துவதற்காக இந்திய விஞ்ஞானிகள் குழுவிற்கு தலைமைத் தாங்கினார். மேலும் அவர் நார்வேயிலுள்ள ஓஸ்லோவில் நடந்த மனித மற்றும் உயிர்க்கோளத்தை பற்றிய யுனெஸ்கோ திட்டத்தில் இந்தியாவை பிரதிநிதித்துவப்படுத்தினார். அவர் 1950 களில் அவரது மகன் விஸ்வநாத் உடன் நீலகிரி மற்றும் மருத மலைகளுக்கு சென்றபோது மலைப் பிரதேசங்களின் மீதான நேசம் அவருக்கு உருவானது. அதேபோல, 1954, 1955 மற்றும் 1956 ஆகிய வருடங்களில் மூன்று முக்கிய சோதனைகளுக்காக வடகிழக்கு மலைகள், டேராடூன் (1950), முசோரி/சாக்ரதா (1952), நைனிடல், கர்வால் ஹிமாலயா, ஹர்த்தோலா (1952), பஞ்சாப்/ஹிமாச்சல் ஹிமாலயா, தவுலா

தார் எல்லை (1953) மற்றும் குலு, மணாலி, லஹால் மற்றும் ஸ்பிட்டி பகுதிகள், உள் அல்லது கிரேட் ஹிமாலயன் எல்லை ஆகிய இடங்களுக்கு சென்றிருந்தார். அவர் 1963 ஆம் ஆண்டு தனது அதிகாரபூர்வ சுற்றுப்பயணத்தின் போது, முன்னாள் சோவியத் ஒன்றியத்தின் மலைப் பகுதிகளான அலாய்-பாமிர், டைன் ஷான், குன் லூன், காசுஸ், யுரேல்ஸ் முதலியவற்றிற்கு இந்திய அணியின் குழுத்தலைவராக இருந்தார். அவர் மாஸ்கோ, டிபிலிசி, லெனின்கிராட், கியேவ், பாக்கு, அல்மா அட்டா, சமர்கண்ட், தாஷ்கண்ட் போன்ற பல அறிவியல் நிறுவனங்களுக்கு அதிக அளவில் பயணம் மேற்கொண்டார். நேபாளத்தின் தலைநகரமான காத்தமண்டுவில் உள்ள டிரிபுவன் பல்கலைக்கழகத்தில் ஒரு வருகை பேராசிரியராக இருந்தார்.

அவர் பசிபிக் மற்றும் பிஜி தீவுகளுக்கிடையே பூச்சி சேகரிப்பு பயணம் செய்தார். மேலும் அவர் தாவேயுனி தீவின் பகுதியிலுள்ள வனுவா லெவிலிருந்தும் பயணம் மேற்கொண்டார். அவரது மகன் விஸ்வநாத்திற்கு தனது மாணவர்களுடன் இணைந்து பணியாற்றும் முறையைப் பயிற்றுவித்தார். மேலும் அவர் புலனாய்வு சேகரிப்பு பயணங்கள், பூச்சிக்கொல்லி மாதிரிகள் மற்றும் ஆராய்ச்சித்தாள்களின் ஆதார வாசிப்பு போன்றவற்றையும் பயிற்றுவித்தார். இவர் அவருடன் 1965 ஆம் ஆண்டில் சிக்கிம், பூட்டான் ஆகிய இடங்களுக்கு சென்றார். மேலும் 1967 இல் குல்டி நாலா பனிப்பாறை மற்றும் இமாலய மலையின் உள் வரம்பான ஸ்பிட்டிக்கு சென்றிருந்தார்.

வெளியீடுகள் :

- ♦ உயர்தர நுண்ணுயிரியல் அறிமுகம், லண்டன், மெதென் & கோ, 1962.
- ♦ தாவரவியல் பூங்காவின் சுற்றுச்சூழல், ஹேக், டாக்டர் டபிள்யூ. ஜங்க் பப்ளிஷர்ஸ், 1964.
- ♦ சுற்றுச்சூழல் மற்றும் உயிரியல் உயர்தர பூச்சிகள், ஹேக், டாக்டர் டபிள்யூ. ஜங்க் பப்ளிஷர்ஸ், 1968.
- ♦ இமயமலையின் ஸ்பிங்க் என்ற வண்டுகள், கல்கத்தா, தாக்கர், 1967.
- ♦ இந்தியாவில் சுற்றுச்சூழல் மற்றும் சூழியல் ஆய்வு, ஹேக், டாக்டர் டபிள்யூ. ஜங்க் பப்ளிஷர்ஸ், 1974.

♦ இந்தியாவின் தாவர கால்வாய்கள், மெட்ராஸ், மெக்மில்லன் & கோ., 1974.

♦ பொது பூச்சியியல், புது தில்லி, ஆக்ஸ் போர்ட் மற்றும் ஐபிஏச் 3வது & விரிவுபடுத்தப்பட்ட பதிப்பு, 1982.

வகித்தப் பதவிகள் மற்றும் விருதுகள் :

♦ கௌரவ ஆராய்ச்சி பணியாளர், இந்திய விலங்கியல் ஆய்வு நிறுவனம், கல்கத்தா (1933-1937).

♦ ஆராய்ச்சி உதவியாளர், பூச்சியியல் பிரிவு, அரசுக்குரிய வேளாண் ஆராய்ச்சி நிலையம் (IARI), புசா, புது தில்லி (1937-1945).

♦ உயிரியல் மற்றும் பூச்சியியல் பேராசிரியர், பூச்சியியல் பள்ளி, செயின்ட். ஜான்ஸ் கல்லூரி, ஆக்ரா (1945-1956).

♦ இந்திய விலங்கியல் ஆய்வு நிறுவனம், கல்கத்தா (இயக்குநராக ஓய்வு) (1956-1968).

♦ வடமேற்கு இமயமலையின் தொடர்ச்சியான நீரோட்டத்தில் பனிக்கட்டி மண்டலத்தின் பூச்சிகளை பற்றிய திட்டம் (1968-1970).

♦ ஓய்வுபெற்ற பேராசிரியர், பூச்சியியல் பள்ளி, செயின்ட். ஜான்ஸ் கல்லூரி, ஆக்ரா (1968-1982).

♦ இந்தியாவில் சால்சிடாய்டை வகைப் படுத்துவதற்கான திட்டம். பி.எல்-480. ப்ரோக்டோட் ரூபோய்டியாவின் வகைபிரித்தல் திட்டம் (1970-1971(பி.எல்.480)).

♦ இந்திய விலங்கியல் ஆய்வு, சென்னை (1984-1990).

♦ சால்சிடோய்டின் சூழலியல் மற்றும் வகைப்பாட்டியல் மீதான திட்டம் மற்றும் தேக்கு/சால் காட்டு சூழலியலின் தட்ப வெப்பநிலை மற்றும் பிற ஒட்டுண்ணிகள் ஆகியவற்றை பற்றிய திட்டம் (1981-1986).

♦ கிழக்குத் தொடர்ச்சிமலைகள் பூச்சி ஆய்வு திட்டம் (1985-1988).

♦ ஓய்வுபெற்ற பேராசிரியர், மாநில கல்லூரி, சென்னை (1991-2003).

♦ DOEN-பட்டாம்பூச்சியின் மகரந்தம் பற்றிய திட்டம்.

உயிரி உணர்வீக்களின் போக்குகள் மற்றும் சுகாதாரத்துறையில் அவற்றின் பயன்பாடுகள்

முனைவர் தாமோதரன் நெடுமாறன்

பேராசிரியர் மற்றும் தலைவர், மத்திய கருவியியல் மற்றும் சேவை ஆய்வகம்,
சென்னைப் பல்கலைக்கழகம், கிண்டி வளாகம், சென்னை 600 025

மின்னஞ்சல்: dnmaran@gmail.com <mailto:dnmaran@gmail.com>, dnmaran@yahoo.com
<mailto:dnmaran@yahoo.com>, dnmaran@unom.ac.in <mailto:dnmaran@unom.ac.in>

சுருக்கம் :

இந்த கட்டுரையிலிருந்து உயிரி உணர்வீக்களின் வரலாறு, அடிப்படை கொள்கைகள், அதன் கூறுகள், வகைகள், செயல்படும் விதம் மற்றும் மருத்துவத் துறையில் அவற்றின் பயன்பாடுகளை படித்து அறிந்து கொள்ளலாம்.

1. உயிரி உணர்வீக்களின் வரலாறு :

உயிரி உணர்வீக்களின் வரலாறு 1920-ஆம் ஆண்டில் தொடங்கப்பட்டது. இது தற்போது, ஆய் வாளர்கள் மத்தியில் அதிக ஆர்வத்தையும் மற்றும் முன்னோக்கு ஆராய்ச்சி பயன்பாடுகள் சென்று சேர்வதற்கும், அடைவதற்கும் வழிவகுத்திருக்கிறது. “உணர்வீ” என்ற சொல் வழக்கமாக சற்றே சிறியதாக இருக்கும் பகுப்பாய்வுசாதனம். பெரும்பாலும், அது ஒரு குறிப்பிட்ட ரசாயனத்தை அளவிட, ஒரு (திரவ) சூழலில் வைக்கப்பட்டு, அதனுடைய குறிப்பிட்ட பண்புகளான, மின்சாரம், மின்னழுத்தம், மின்தடை மற்றும் பிற பண்புகள் அளவிடப்படுகின்றன. முதல் இரசாயன உணர்வீ, 1922-ஆம் ஆண்டில் உருவாக்கப்பட்ட கண்ணாடி ஹைட்ரஜன் சதவீத மின்முனையாகும் (pH Glass Electrode). இதற்கு அடுத்த இரசாயன உணர்வீ, 1954-இல் லெயாண்ட் கிளார்க் (Leland Clark)

கண்டுபிடித்த ஆக்ஸிஜன் மின்முனையாகும். இதனை உருவாக்க சுமார் கால் நூற்றாண்டு தேவைப்பட்டது. 1954-இல், ஸ்டோ மற்றும் ரேண்டால் (Stow and Randall) இருவரும் சேர்ந்து கார்பன்-டை-ஆக்சைடு மின்முனையை உருவாக்கினார்கள். 1962-ஆம் ஆண்டில் டாக்டர் கிளார்க் (Dr. Clark) கண்டுபிடிக்கப்பட்ட குளுக்கோஸ் மின்முனை, உயிரி உணர்வீ பற்றிய அறிவியல் மற்றும் தொழிற்நுட்ப உண்மையை முதலில் அறிமுகப்படுத்தியது. 1969-ஆம் ஆண்டில் குயில்பால்ட் (Guilbault), மின்னழுத்த உணர்வீயை உருவாக்கினார். 1975-ஆம் ஆண்டில், ஜனதா மற்றும் லுபர்ஸ் (Janata and Lubbers) ஆகியோர் முறையே தடுப்புமருந்து மற்றும் ஒளிமின்முனையை உருவாக்கினார்கள். பின்னர், 1979-ஆம் ஆண்டில் ஷூல்ட்ஸ் (Schultz) என்பவரால் ஒளி இணக்க உணர்வீக்கள் அறிமுகப்படுத்தப்பட்டன. 1991-ஆம் ஆண்டில், ஃபோடாரால் (Fodor) அறிமுகப்படுத்தப்பட்ட

சிலிகான் சில்லு தொழிற்நுட்பத்தை அடிப்படையாக கொண்டு உயிரியளவு உணர்வீக்களின் வளர்ச்சிக்கு தேவையான தொழில்நுட்பங்கள் உருவாக்கப்பட்டன. இதன் பிறகு, பல உணர்வீ தொழிற்நுட்பங்களின் அறிமுகம் மற்றும் வளர்ச்சி வேகமாகப் பெருகி வருகின்றன.

2. அறிமுகம்

உயிரியல் அங்கீகார கூறுகள் சமீபத்திய ஆண்டுகளில் அசாதாரண ஆர்வத்தை ஈர்த்துள்ளன, ஏனெனில் அவை மிகவும் முக்கியத்துவம் வாய்ந்த மற்றும் தேர்ந்தெடுக்கப்பட்ட இரசாயன பகுப்பாய்வின் வளர்ச்சியில் முக்கிய பங்கு வகிக்கின்றன. சமீபத்தில் முன்மொழியப்பட்ட IUPAC வரையறையின்படி [1], "உயிரிஉணர்வீ என்பது ஒரு சுய-கட்டுப்படுத்தப்பட்ட ஒருங்கிணைந்த சாதனம் ஆகும். இது உயிரியல்-அங்கீகார உறுப்பு (உயிர்வேதியியல் வாங்கி) மூலம் குறிப்பிட்ட அளவு அல்லது பாதி-அளவு பகுப்பாய்வு தகவலை வழங்கக்கூடிய திறன் கொண்டது. இது நேரடி வெளி-சார்ந்த தொடர்பில் உள்ள ஒரு ஆற்றல்-மாற்றி உறுப்பாகும். ஒரு உயிரி உணர்வீ, ஒரு உயிரி-பகுப்பாய்வு முறையிலிருந்து தெளிவாக வேறுபடுத்தப்பட வேண்டும். ஏனென்றால், உயிரிஉணர்வீக்களுக்கு கூடுதலாக செயலாக்க வழிமுறைகள் தேவைப்படுகிறது. உதாரணமாக, ஒரு வினைப்பொருள் தேவைப்படுகிறது. மேலும், ஒரு உயிரிஉணர்வீயிலிருந்து ஒரு உயிரி-வினவி வேறுபடுத்தப்பட வேண்டும். அதாவது, உயிரிஉணர்வீ ஒரு அளவீடு முடிந்த பிறகு அதனை பயன்படுத்தி பகுப்பாய்வு செறிவைத் தொடர்ந்து கண்காணிக்க முடியாது." ஒரு உயிரிஉணர்வீ, ஆற்றல்-மாற்றியுடன் ஒருங்கிணைந்த சுற்றுக்களை நுண்-சில் அடிப்படையிலான தொழிற்நுட்பத்தை கொண்டு வடிவமைக்கப்படுகின்றன. இவை, உயிரி-சில் [2] என அழைக்கப்படுகின்றன. உயிரிஉணர்வீயின் முக்கிய பண்புகளாக தேர்ந்தெடுக்கும் திறன் (selectivity) மற்றும் உணர்திறன் (sensitivity) இருக்கிறது. தேர்ந்தெடுக்கும் தன்மை, உயிரி-வாங்கி (Bio-receptor) மூலக்கூறுகளின் உள்ளார்ந்த பிணைப்பின் திறன்களை முழுமையாக சார்ந்துள்ளது. ஆனால், உணர்திறன் உயிரியல்-

உறுப்பின் தன்மையையும் மற்றும் எதிர்வினை கண்டறிவதற்கு பயன்படுத்தப்படும் ஆற்றல்-மாற்றிகளின் வகையையும் சார்ந்துள்ளது [3]. உயிரிஉணர்வீக்களின் (Biosensors) முக்கிய செயல்பாட்டுத் தேவைகளில் முக்கியமானது, ஒரு குறிப்பிட்ட இலக்கு பகுப்பாய்வுக்கான உயிரி-அங்கீகார உறுப்பு தேர்ந்தெடுப்பு மற்றும் தலையீடு-செய்யும் இனங்கள் அல்லது கலவைகள் முன்னிலையில் இந்த தேர்ந்தெடுப்புத்திறனை பராமரிப்பதற்கான திறன் ஆகும் [4-6].

தேர்ந்தெடுக்கும் திறன் உயிரி-வாங்கி பகுப்பாய்வு மூலக்கூறுடன் இணைப்பதற்கான திறனைப் பொறுத்தது. உயிரியல் தேர்ந்தெடுக்க அடிப்படையிலான உயிரி-வாங்கிகள் (அதாவது பிரபொருளேதிரி (ஆன்டிபாடிகள்) மற்றும் அணுக்கூறுகள் (லைகாண்ட்ஸ்) போன்றவை) அல்லது உயிரியல் முறைகளைப் பயன்படுத்தி உருவாக்கப்படும் உயிரி-வாங்கிகள் (அப்டமர்கள், புரதக்கூறுகள், மேற்பரப்பில்-பதிக்கப்பட்ட பாலிமர்கள், அல்லது மூலக்கூறு பதிக்கப்படும் பாலிமர்கள்) மிகவும் தேர்ந்தெடுக்கப்பட்ட உயிரியல் அங்கீகார அமைப்புகள் உருவாக்க பயன்படுகின்றன. உயிரிஉணர்வீக்களின் மற்றொரு செயல்பாட்டு தேவை உணர்திறன். இது, மேற்பரப்பு வடிவியல் [7], உணர்வீ பொருள் பண்புகள் [8], அளவீட்டு முறையின் தீர்மானம், மற்றும் மேற்பரப்பில் உயிரி-அங்கீகார உறுப்பை ஊக்குவிப்பதில் பயன்படுத்தப்படும் வேதியியல் [9] போன்ற பல காரணிகளை பொருத்து அமைகிறது.

3. உயிரிஉணர்வீக்களின் சீதவை

2013-ஆம் ஆண்டில், மருத்துவ பிரிவில் கொலஸ்ட்ரால் சோதனை, இரத்த குளுக்கோஸ் கண்காணிப்பு, இரத்த வாயு பகுப்பாய்வி, கர்ப்ப பரிசோதனை, மருந்து மற்றும் தொற்று நோய்கள் கண்டுபிடிப்பு ஆகியவற்றில் உயிரி உணர்வீக்களின் பயன்பாடு 66% சந்தை பங்குடன் ஆதிக்கம் செலுத்தியது. 2016-ஆம் ஆண்டில் உலகளாவிய உயிரிஉணர்வீக்களின் சந்தை அளவு 15.6 பில்லியன் டாலராக மதிப்பிடப்பட்டுள்ளது. 2016-20 காலப்பகுதியில், 7.9 சதவீத கூட்டு-வருடாந்த வளர்ச்சி விகிதம்

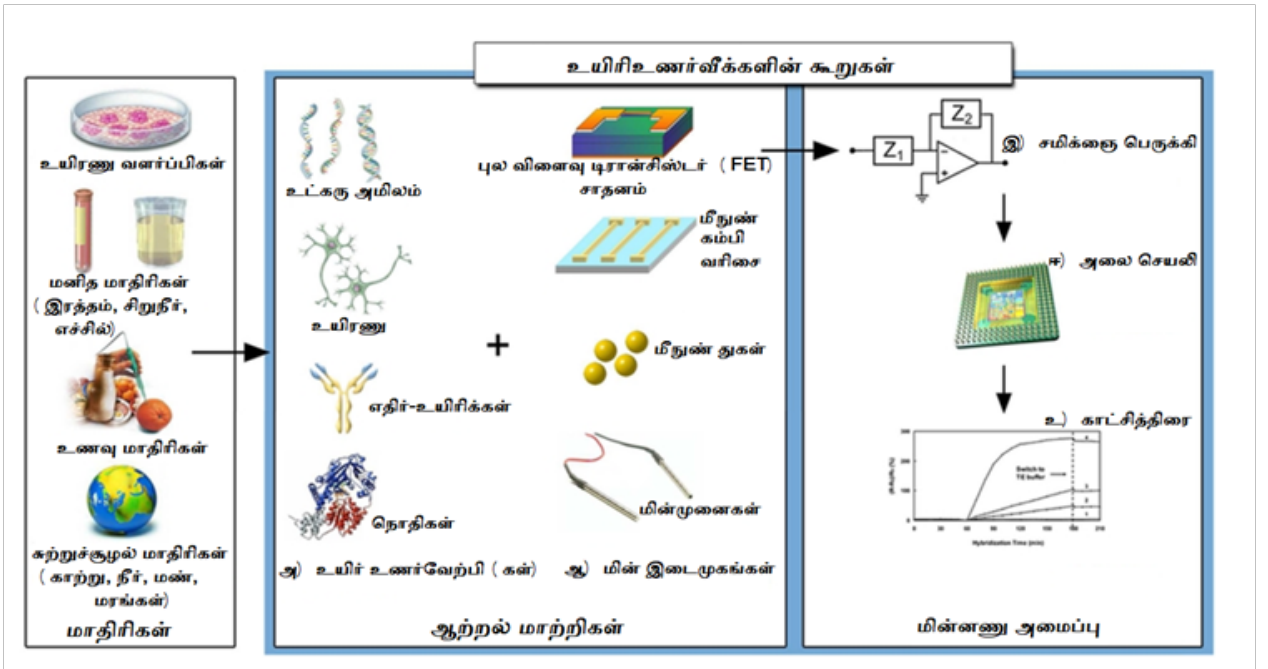
(Compound Annual Growth Rate (CAGR)) என எதிர்பார்க்கப்படுகிறது. மருத்துவ துறையில், நீரிழிவுநோயால் பாதிக்கப்படும் மக்கள்தொகை உயர்வு, சுருக்கப்பட்ட (மினியேச்சர்) நோயறிதல் சாதனங்களுக்கான அதிக தேவை மற்றும் விரைவான தொழில்நுட்ப முன்னேற்றங்கள் ஆகியவை சந்தையின் வளர்ச்சிக்கு அடிப்படை உந்துதல்காரணிகளாக இருக்கின்றன. சமீபத்திய ஆண்டுகளில், ஒருமுறை பயன்படுத்தக்கூடிய, எளிமையான, செலவு-குறைந்த, விரைவான செயல்திறன் மற்றும் பயனர்-நட்பு சாதனங்களின் தேவை அதிகரித்துள்ளது.

இந்த அடிப்படைகளை நிறைவேற்றும் வகையில், மருத்துவ விஞ்ஞானம், வேதியியல் மற்றும் மீநுண்-தொழில்நுட்ப (நானோடெக்னாலஜி) அணுகுமுறைகளின் ஏற்பட்டுள்ள மேம்பாடுகள் மூலம் திறன் கொண்ட உயிரிணர்வீக்களை மருத்துவத்துறையில் விரைவாக உற்பத்தி செய்ய வழிவகுத்திருக்கின்றன. மேலும், லாக்டேட், குளுக்கோஸ், கிரியாட்டின் மற்றும் யூரியா போன்ற இரத்த வளர்சிதைகளை அளவிடுவதற்கான உயிரிணர்வீக்களில் ஒளியியல் மற்றும் மின்வேதியல் கடத்துகை முறைகள் பயன்

படுத்தப்படுகின்றன. இவை, வணிக-ரீதியாக சோதனை கவனிப்பு ஆய்வகங்கள் மற்றும் சுய சோதனைக்கு உட்படுத்தப்படுகின்ற குளுக்கோஸ் கண்காணிப்பு முதலியவற்றில் பயன்படுத்தப்படுகின்றன.

4. உயிரிணர்வீக்களின் கூறுகள் :

ஒரு உயிரிணர்வீ என்பது ஒரு உயிரி-பகுப்பாய்வு கருவியாகும். இது ஒரு உயிரியல் பொருளையோ அல்லது உயிரி-பிரதி பொருளையோ அல்லது உடற்கூறு-வேதியியல் ஆற்றல்-மாற்றியையோ அல்லது ஆற்றல்-மாற்றும் நுண் அமைப்பையோ தன்னக்கதே கொண்டிருக்கும். ஆற்றல்-மாற்றியானது, ஒளியியல், மின்வேதியியல், வெப்ப-அளவியல், அழுத்த-மின்னியல் அல்லது காந்தவியலை அடிப்படையாக கொண்டுள்ளது. ஒரு ஆற்றல்-மாற்றியின் நோக்கம், ஒரு பகுப்பணு அல்லது தொடர்புடைய பகுப்பணு தொகுதியின் விகிதாசாரமாக இருக்கும் ஒரு மின்னணு சமிக்ஞையை உருவாக்க உதவுவதாகும். ஒரு உயிரிணர்வீயின் அத்தியாவசிய கூறுகள் படம் 1-இல் காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 1: உயிரிணர்வீக்களின் கூறுகள்

5. கண்டறிதல் முறைகள்

உயிரி மூலக்கூறுகளை உணரவும் மற்றும் கண்டுபிடிப்பதற்கும் பலவிதமான கண்டறிதல் முறைகள் உருவாக்கப்பட்டுள்ளன [10, 11]. அவற்றைப்பற்றிப் பின்வரும் பிரிவுகள் பேசுகின்றன.

5.1. ஒளியியல் (ஆப்டிகல்)

ஓப்ளூரசென்ஸ்: ஓப்ளூரசென்ஸ் நூட்பங்கள் உயிரி மூலக்கூறுகளின் முக்கிய கண்டறிதலை வழங்குகின்றன. மேலும், ஒளிரும் தீவிரத்தன்மை, உமிழ்வு தீவிரத்திற்கு விகிதாச்சாரமாக இருப்பதால், பலவீனமான சமிக்ஞைகளைக் கூட இதன் மூலம் உணர முடியும். கடந்த தசாப்தத்தில், கண்ணாடி இழை (ஓபைபர்) சார்ந்த உயிரி உணர்வீக்கள் அதிகளவில் உருவாக்கப்பட்டுள்ளன. இந்த உயிரி உணர்வீக்கள், உயிரணுக்களின் செயல்பாட்டு மாற்றங்களையும் மற்றும் நச்சுத்தன்மையுள்ள பொருட்கள் வெளிப்படும் போது உண்டாகும் வளர்சிதை மாற்றம் மற்றும் உயிரணு இறப்பு முதலியனவற்றை கண்டறியும் திறன் கொண்டவை. உறிஞ்சுதல் மற்றும் ஏதிரொளித்தல் அடிப்படையிலான நொதி ஒளியியல் கண்ணாடி இழை உயிரி உணர்வீக்களுடன் ஒப்பிடுகையில், ஓப்ளூரசென்ஸ் அளவீடுகள் பெரும்பாலும் பயன்படுத்தப்படுவது இல்லை. ஏனெனில், ஓப்ளூரசென்ட் பொருட்கள் அல்லது இடைநிலைகளை உற்பத்தி செய்ய நொதி எதிர் விளைவுகள் பொதுவானதல்ல. பெரும்பாலான ஓப்ளூரசென்ஸ் நூட்பங்கள், ஒரு ஒளிரும் சாயத்தை பயன்படுத்தி ஒரு ஆற்றல்-மாற்றியின் உருவாக்கம் அல்லது நுகர்வினை மறைமுகமாக கண்காணக்கும்.

ஓப்ளூரசென்ஸ் ஆப்டிகல் முறையின் தேர்ந்தெடுக்கும் திறன் மற்றும் உணர்திறன் காரணமாக இது உயிரி உணர்வீக்களில் பரவலாகப் பயன்படுத்தப்படுகின்றன. ஒரு ஓப்ளூரசென்ஸ் - அடிப்படையிலான சாதனம் முந்தைய கதிரியக்க உறிஞ்சுதலால் உமிழப்பட்ட மின்காந்த கதிர்வீச்சு அதிர்வெண் மாற்றத்தையும் மற்றும் மிக குறுகிய காலத்திற்கு மட்டுமே தூண்டப்பட்ட நிலையில் வெளியேறும்

கதிரியக்கத்தையும் கண்காணிக்கிறது. மேலும், இதன் மூலம் ஒரே மூலக்கூறு மீண்டும் மீண்டும் தூண்டப்பட்டு, ஒற்றை செல் மட்டத்தில் கூட எளிதாக அளவிடப்படும் ஒரு பிரகாசமான சமிக்ஞையை உற்பத்தி செய்கிறது.

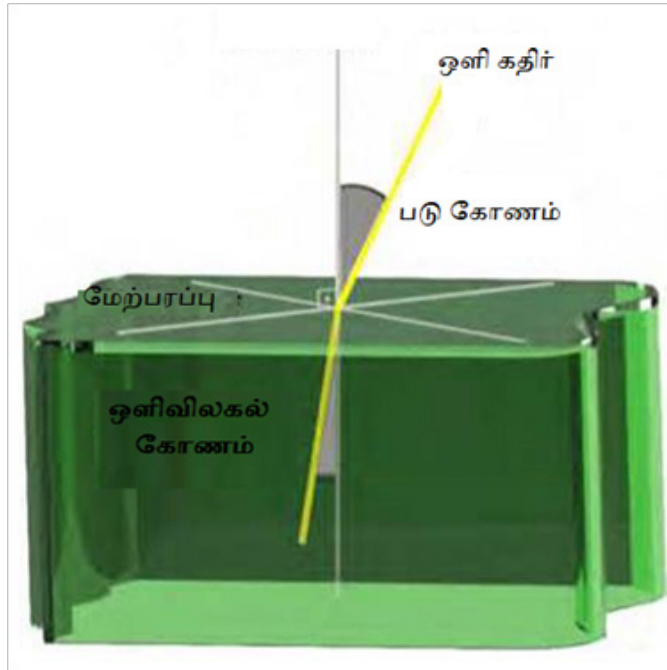
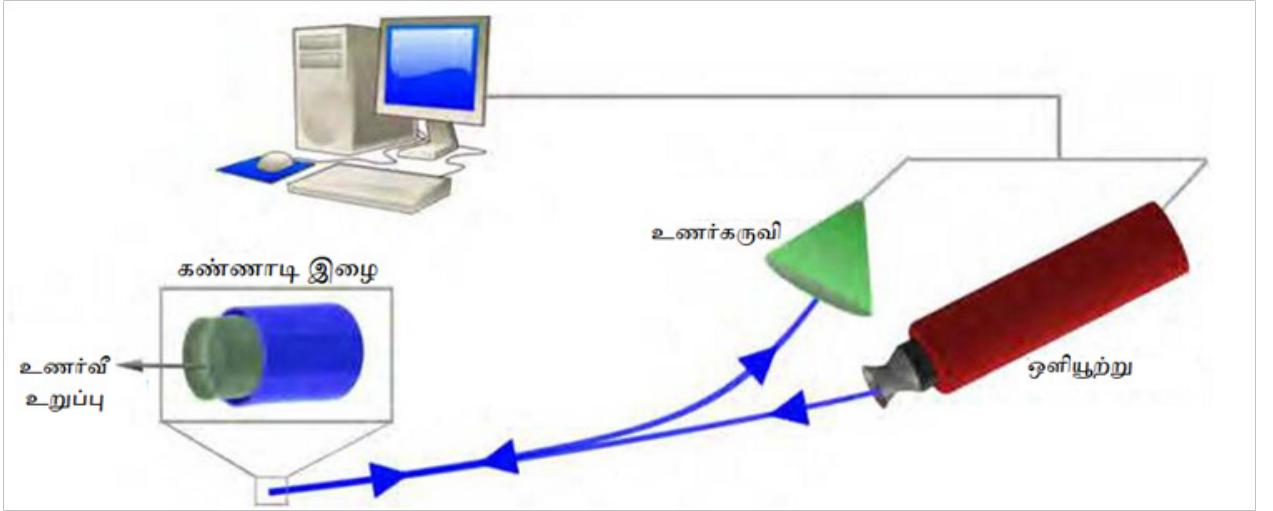
உறிஞ்சுதல் (Absorbance): குறிப்பிட்ட அலைநீளத்தை உறிஞ்சும் பகுப்பணுக்களின் செறிவின் மாற்றத்தைத் தீர்மானிக்க எளிமையான ஒளியியல் உயிரி உணர்வீக்கள் (ஆப்டிகல் பையோசென்சர்கள்), உறிஞ்சும் அளவீடுகளைப் பயன்படுத்துகின்றன. இது ஒரு மாதிரி மீது ஒளியியல் கண்ணாடி இழை (ஆப்டிகல் ஓபைபர்) மூலம் ஒளியை ஊடுருவ செய்து, பகுப்பணுக்களின் மூலம் உறிஞ்சப்பட்ட ஒளியின் அளவு அதே கண்ணாடி இழை அல்லது இரண்டாவது கண்ணாடி இழை மூலம் கண்டறியப்படுகிறது. ஒளியியல் இழைகளின் நீளமான முடிவில் அசைவற்ற நிலையிலுள்ள உயிரியல் பொருளின் மீது படும் ஒளியை உறிஞ்சி பகுப்பணுக்களை உற்பத்தி செய்கிறது.

பிரதிபலிப்பு (Reflection): இதில் ஒரு நிறவளவியல் ஒத்திசைவு விளிம்பு கூழ்மப்பிரிப்பு மேற்பரப்பு பிணைப்பு தளமாக பயன்படுத்தப்பட்டு, மூலக்கூறு தொடர்புகளை கண்டுபிடிப்பதற்கு உதவும் ஒரு புதுமையான அணுகுமுறையாகும். கூழ்மப்பிரிப்பு வெள்ளை ஒளியுடன் ஒளிரும் போது, ஒரு ஒற்றை அலைநீளத்தை பிரதிபலிக்கும் வகையில் வடிவமைக்கப்பட்டுள்ளது. மூலக்கூறுகள் மேற்பரப்புடன் இணைக்கப்படும் போது, பிரதிபலித்த ஒளியின் அலைநீளம் ஒளியியல் பாதையில் ஏற்பட்ட மாற்றத்தின் காரணமாக மாற்றியமைக்கப்படுகிறது. ஒளி-வாங்கி மூலக்கூறுகளை கூழ்மப்பிரிப்பு மேற்பரப்பில் இணைப்பதன் மூலம், எந்தவொரு ஒளிரும் ஆய்வி அல்லது துகள் பதிப்பி பயன்பாடு இல்லாமல் நிரப்பு-பிணைப்பு மூலக்கூறுகளை கண்டுபிடிக்கலாம்.

மற்ற ஒளியியல் முறைகள்: இந்தவகை உயிரி உணர்வீக்களில், மேற்பரப்பு பிளாஸ்மோன் ஒத்திசைவு (Surface Plasmon Resonance), பரந்த-மேற்பரப்பு பிளாஸ்மோன் ஒத்திசைவு, ஓப்ளூரேசன்ஸ் ஸ்பெக்ட்ரோஸ்கோபி, இண்டர்ஓபெரோமெட்ரி,

மொத்த உள் பிரதிபலிப்பு, ஒளி சுழற்சி மற்றும் துருவப்படுத்தல் போன்ற ஒளியியல் முறைமைகள் பயன்படுத்தப்படுகின்றன. பெரும்பாலும், ஒளியியல் உயிரிணர்வீக்களில், மேற்பரப்பு பிளாஸ்மோன் ஒத்திசைவு (SPR) நிகழ்வுகள் பயன்படுத்தப்படுகின்றன. SPR உயிரிணர்தலில், ஒரு மேற்பரப்பு உயிரி-

வாங்கி மீது ஒட்டிக்கொள்ளும் இலக்கு-பகுப்பணுக்களை, மோதும் ஒளியின் ஒத்திசைவு நிகழ்வுகளால் ஏற்படும் மேற்பரப்பு பிளாஸ்மோன் அலையின் (SPW) திசை மாற்றத்தை கண்காணிப்பதன் மூலம் அளவிடப்படுகிறது. படம் 2-இல் ஒளி-உயிரிணர்வீக்களின் செயல்படும் கொள்கையும் காட்டப்படுகின்றன.



படம் 2: ஒளி உயிரிணர்வீக்கள் செயல்படும் விதம்

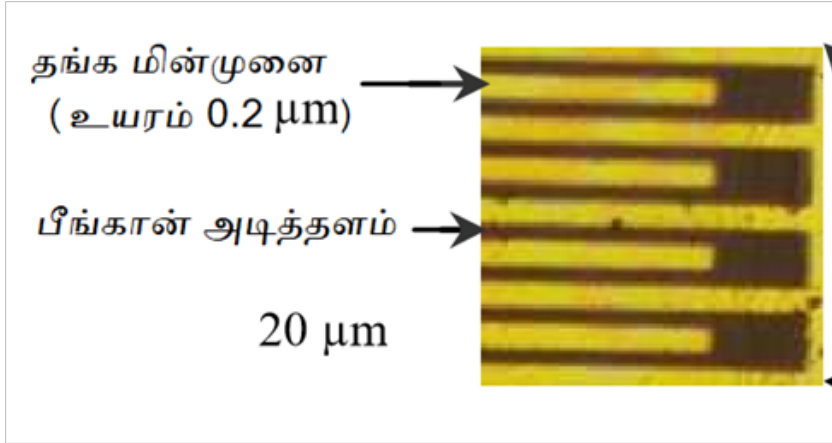
SPW-ஆனது எதிர்மறை மின்கடத்தா மாறிலிகளை கொண்ட உலோக மற்றும் குறைகடத்தி ஊடகங்களின் இடைமுகத்தில் ஏற்படும் ஒரு மின்னூட்ட அடர்த்தி அலைவு ஆகும். இந்த மேற்பரப்பு பிளாஸ்மன் அலை இருப்பது உலோகத்தின் மின்காந்த (EM) பண்புகள், பொதுவாக தங்கம் அல்லது வெள்ளி மற்றும் குறைகடத்தி இடைமுகம் ஆகியவற்றால் உறுதி செய்யப்படுகிறது. ஒளிரும் ஒத்திசைவு இணைத்தல் ஒளி நிறமாலையின் எதிரொளிப்பில், இது ஒரு முற்றுப்புள்ளி போல் தோன்றுகிறது. இதன் அலைநீளம், ஒளிவிழும் கோணம் அல்லது பிரதிபலித்த வெளிச்சத்தின் தீவிரத்தை அளவிடுவதன் மூலம் இந்த வகை உயிரிஉணர்வீக்கள் பாரம்பரியமாக கண்காணிக்கப்படுகின்றன. SPW-யுடன் ஒளியின் இணைப்புக்கு, உயர்-குறியீட்டு ஒளிப்பட்டகம் அல்லது கால-கூழ்மப்பிரிப்பு மேற்பரப்பு போன்றவை மின்காந்த

காரணங்களுக்காக தேவைப்படுகின்றன. SPR-இன் உணர்திறன் SPW-இன் வலுவான மின்காந்த மேம்பாட்டை பொருத்து அமைகிறது.

5.2. மின்வெதியியல்

இந்தவகை உயிரிஉணர்வீக்கள் எலக்ட்ரான் களை உற்பத்தி செய்யும் அல்லது நுகரும் ஒரு எதிர்வினையினைப் பயன்படுத்துகின்றன. இவைகள் ஐந்து முக்கிய பிரிவுகளாக வகைப்படுத்தப்படுகின்றன [12-14]. இவற்றைப் பற்றி இந்த பிரிவில் காணலாம்.

மின்கடத்தி உயிரிஉணர்வீ: இதில் கண்டறிதல் என்பது உயிரியக்க இரசாயன எதிர்வினைகளை அடிப்படையாகக் கொண்டது. இது இரண்டு இணை மின்முனைகளுக்கு இடையில் ஏற்படும் மின்சார எதிர்ப்பின் மாற்றங்களை அளப்பதன் மூலம் மின்கடத்தலை அளவிடுகிறது. படம் 3-இல் ஒரு மின்கடத்தி உயிரிஉணர்வீயின் பாகங்களை காணலாம்.



படம் 3: மின்கடத்தி உயிரிஉணர்வீயின் பாகங்கள்

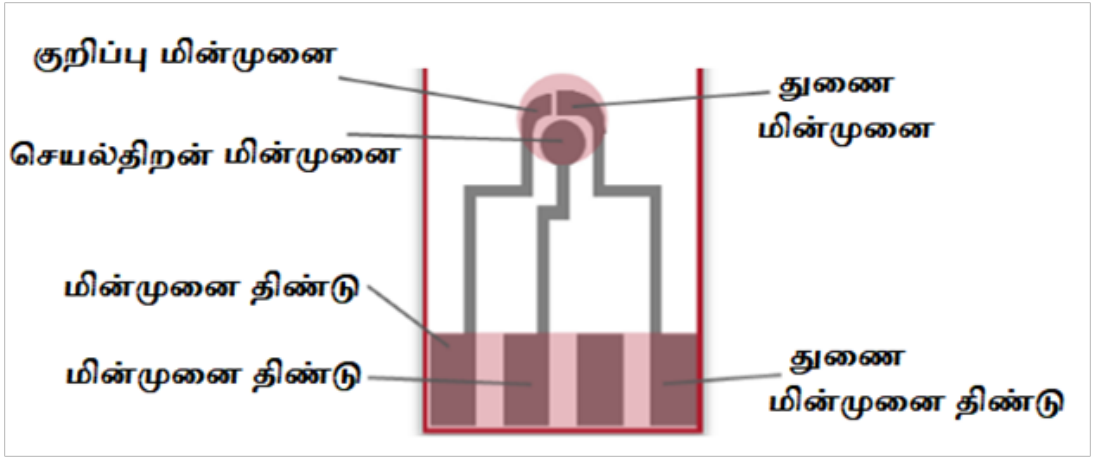
மின்னழுத்த உயிரிஉணர்வீ: இதில், உயிரி-அங்கிகார செயல்முறையை ஒரு சாத்தியமான சமிக்ஞையாக மாற்றுவதன் மூலம் பகுப்பாய்வு தகவல் பெறப்படுகிறது. ஒரு செயல்திறன் மின்முனையின் மின்னோட்டத்தை ஒரு குறிப்பு மின்முனையின் மின்னோட்டம் பூஜ்ஜிய நிலைமையில் இருக்கும் போது துல்லியமான கண்காணித்தல் இதன் முக்கிய நோக்கமாகும். இந்த உயிரிஉணர்வீக்கள் அயனி-தேர்ந்

தெடுக்கப்பட்ட மின்முனைகள் (Ion-Selective electrodes-ISE) மற்றும் அயனி-உணர் புல விளைவுடிரான்சிஸ்டர்கள் (Ion-sensitive field effect transistors-ISFET) [14-18] அடிப்படையிலானவை. இதில், முதன்மை வெளியீடு சமிக்ஞை ஏற்பட, அயனி-தேர்ந்தெடுக்கப்பட்ட சவ்வு இடைமுகத்தில் திரட்டப்பட்ட அயனி காரணமாக இருக்கலாம். மின்முனையின் வழியாக பாயும் மின்னோட்டத்தின் மதிப்பு, பூஜ்ஜியத்திற்கு

சமமாக அல்லது அதற்கு அணுக்கமாக உள்ளது. நொதி எதிர்வினையின் விளைவாக உண்டாகும் அயனியின் முன்னிலையை மின்முனையானது தொடர்ந்து கண்காணிக்கிறது. எடுத்துக் காட்டாக, குளுக்கோஸ் ஆக்சிடேஸ் ஹைட்ரஜன் சதவீத (pH) மின்முனையின் மேற்பரப்பில் அசைவற்றிருக்கும். குளுக்கோஸ் ஹைட்ரஜன் சதவீத (pH) மின்முனையின் மீதுள்ள செயல்பாட்டு-ஊடகத்தில் மிக

குறைந்த அளவில் வினையை ஏற்படுத்துகிறது. இருப்பினும், நொதித்தல் மூலம் உற்பத்தியாகும் குளுக்கோனேட் அமிலம், அமிலத்தன்மையை ஏற்படுத்துகிறது. இதனால், வெளிப்புற மேற்பரப்பில் அசைவற்றிருக்கும் உயிரி-அங்கிகார உறுப்பு மென்படலத்திற்குள் உட்செல்லுகிறது.

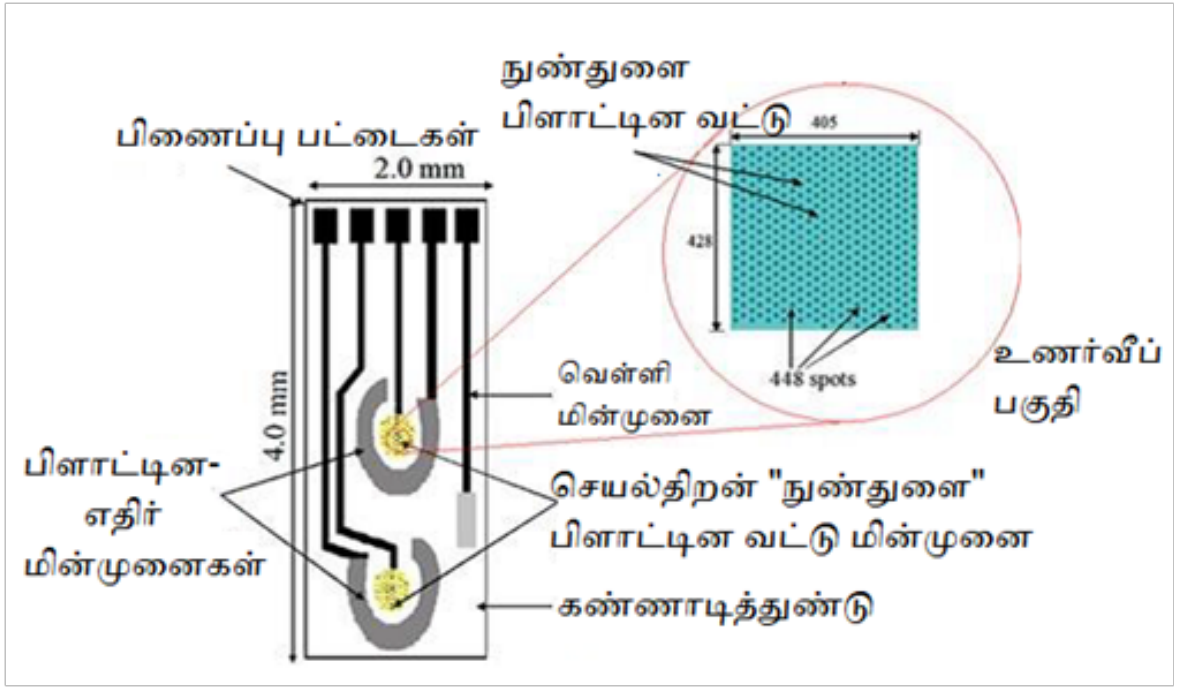
படம் 4-இல் மின்னழுத்த உயிரிஉணர்வீயின் அமைப்பு காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 4: மின்னழுத்த உயிரிஉணர்வீயின் அமைப்பு

மின்னோட்ட உயிரிஉணர்வீ: இந்தவகை உயிரி உணர்வீக்களில் உள்ள மின்செயலியல் பொருட்களில் ஏற்படும் மின்வேதியியல் ஆக்ஸிஜனேற்றம் அல்லது ஆக்ஸிஜனிறக்கம் காரணமாக உருவாகும் மின்னோட்டம் அளவிடப்படுகிறது. மின்னோட்ட உயிரிஉணர்வீக்கள் மின்னழுத்த உயிரிஉணர்வீக்களைக் காட்டிலும் துரிதமான, அதிக உணர்திறன் கொண்ட மற்றும் துல்லியமான உயிரி உணர்வீக்களாகும். இதில் அளப்பதற்கு வெப்பமண்டல சமநிலை ஏற்படும் வரை காத்திருக்க வேண்டிய அவசியமில்லை. மின்னோட்ட உயிரிஉணர்வீயில், கட்டுப்படுத்தப்பட்ட மின்னழுத்த நிலையில்,

மின்செயலியல் பொருட்களில் ஏற்படும் மின்வேதியியல் ஆக்ஸிஜனேற்றம் அல்லது ஆக்ஸிஜனிறக்கம் காரணமாக உருவாகும் மின்னோட்டம் கண்காணிக்கப்படுகிறது. இந்த மின்னோட்டத்தின் அளவு பகுப்பணு அளவுடன் தொடர்புடையது [16]. கிளார்க் (Clark) ஆக்ஸிஜன் மின்முனைகள், மின்னோட்ட உயிரிஉணர்வீக்களின் ஒரு எளிய அடிப்படை வடிவமாகும். ஏனென்றால், இது உண்டாக்கும் மின்னோட்டமானது ஆக்ஸிஜன் செறிவின் விகிதத்தை ஒத்திருக்கும். இது ஆக்ஸிஜன் குறைப்பு மூலம் அளவிடப்படுகிறது. படம் 5-இல் மின்னோட்ட உயிரிஉணர்வீயின் கூறுகள் காண்பிக்கப்பட்டுள்ளன.



படம் 5: மின்னோட்ட உயிரிஉணர்வீயின் கூறுகள்

வோல்ட்டாஇயல் உயிரிஉணர்வீ: இது மின்னோட்ட பகுப்பாய்வு முறைகளில் ஒரு வகையாகும். வோல்ட்டாஇயல் உயிரிஉணர்வீ என்பது ஒரு பகுப்பணு பற்றிய தகவலை ஒரு மின்னழுத்தத்தை மாறுபாடு செய்து, அதன் விளைவாக ஏற்படும் மின்னோட்டத்தை அளவிடுவதன் மூலம் பெறப்படுகிறது. எனவே, இது ஒரு மின்னோட்ட உயிரிஉணர்வீ நுட்பமாகும். இதில் சாத்தியமான மின்னழுத்த மாறுபாடு வழிகளின் அடிப்படையில் வோல்ட்டாஇயல் உயிரிஉணர்வீ பல வகைப்படும். அவையாவன, பொலாரோகிராஃபி, நேரியல் ஸ்லீப், வித்தியாசமான படிக்கட்டு, சாதாரண துடிப்பு, தலைகீழ் துடிப்பு, வேறுபட்ட துடிப்பு, இன்னோரன்ன பல. மிகவும் பரவலாக பயன்படுத்தப்படும் வடிவங்களில் சுழற்சி வோல்ட்டாஇயல் உயிரிஉணர்வீக்களும் ஒன்றாகும். இதனை பயன்படுத்தி பகுப்பாய்வு தீர்வுகள் பற்றிய ரெடாக்ஸ் திறன் மற்றும் மின்வேதியியல் எதிர்வினை விகிதங்கள் (எ.கா. வேதியியல் விகிதம் மாறிலி) பற்றிய தகவல்கள் பெறப்படும். மிக அண்மையில், உள்ளீட்டு-இலக்கவகை வரிசை (inter-digitated array - IDA) நுண்மின்முனைகள் மின்வேதியியல் நோய்-

எதிர்ப்புவரிசை உணர்வீக்களில் மாற்று ஆற்றல்-மாற்றியாக பிரபலமடைந்திருக்கின்றன.

மின்மறுப்பு உயிரிஉணர்வீ: ஒரு குறிப்பிட்ட உயிரியல் அமைப்பின் மின்மறுப்பு அளவினை அளப்பதன் மூலம் அந்த அமைப்பு பற்றிய தகவல்களைக் கொடுப்பது உயிரிஉணர்வீக்களாகும். படம் 6-இல் ஒரு மின்மறுப்பு உயிரிஉணர்வீயின் அமைப்பு காட்டப்பட்டுள்ளது.

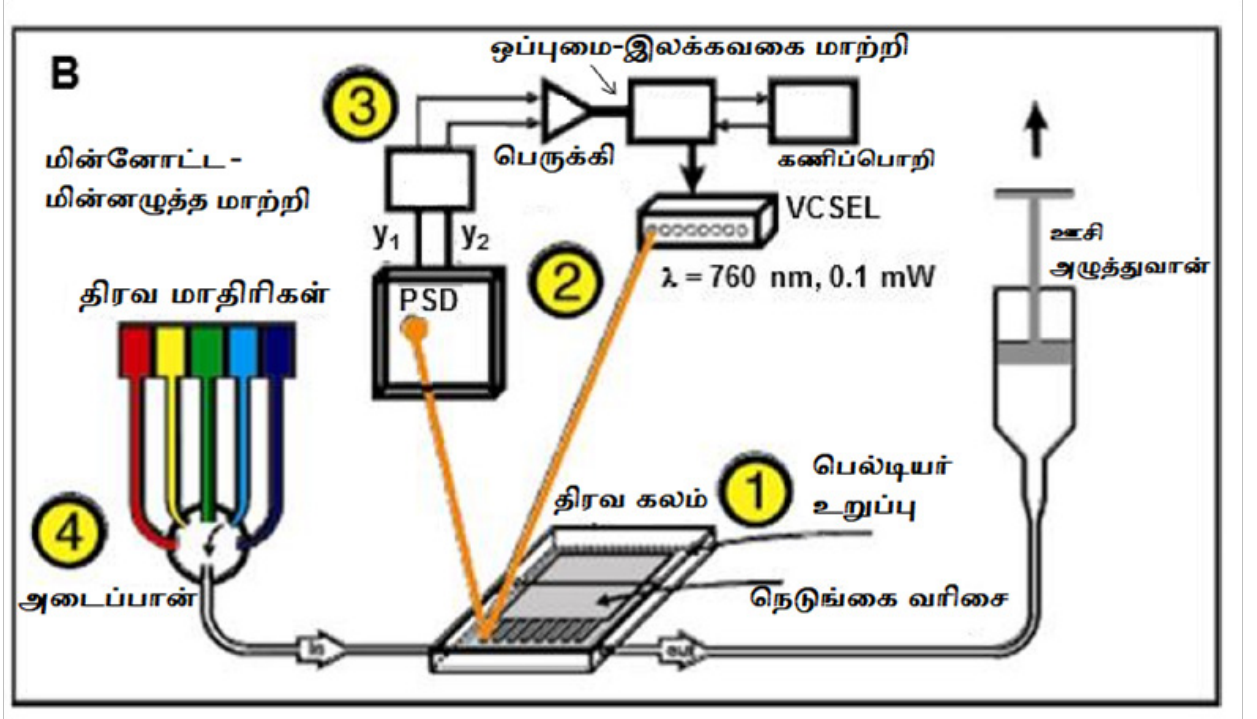


படம் 6: மின்மறுப்பு உயிரிஉணர்வீயின் அமைப்பு

5.3. நிறை உணர்திறன் - அழுத்த மின்சார உயிரிணர்வீ

இதில் ஒரு அழுத்தமின்சாரபடிகத்தின் மீது மின்சார ஆற்றல் பயன்படுத்தப்படும் போது ஒரு மீள் உருமாற்றம் ஏற்படுவதனால், அழுத்தமின்சாரபடிகத்தில் ஒத்திசைவு

ஏற்படுகிறது. இச்சமயம், படிகத்தின் மீது ஒரு உயிரி ஒட்டிக் கொண்டால் அதன் நிறை காரணமாக, அதிர்வெண்ணில் மாற்றம் ஏற்படுகிறது. இதனை கண்டறிவதன் மூலம் சம்பந்தப்பட்ட உயிரியின் செரிவினைக் கண்டறியலாம். படம் 7-இல் ஒரு அழுத்தமின்சார உயிரிணர்வீயின் செயல்பாட்டுத் தொகுப்பு காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 7: அழுத்த மின்சார உயிரிணர்வீயின் செயல்பாட்டுத் தொகுப்பு

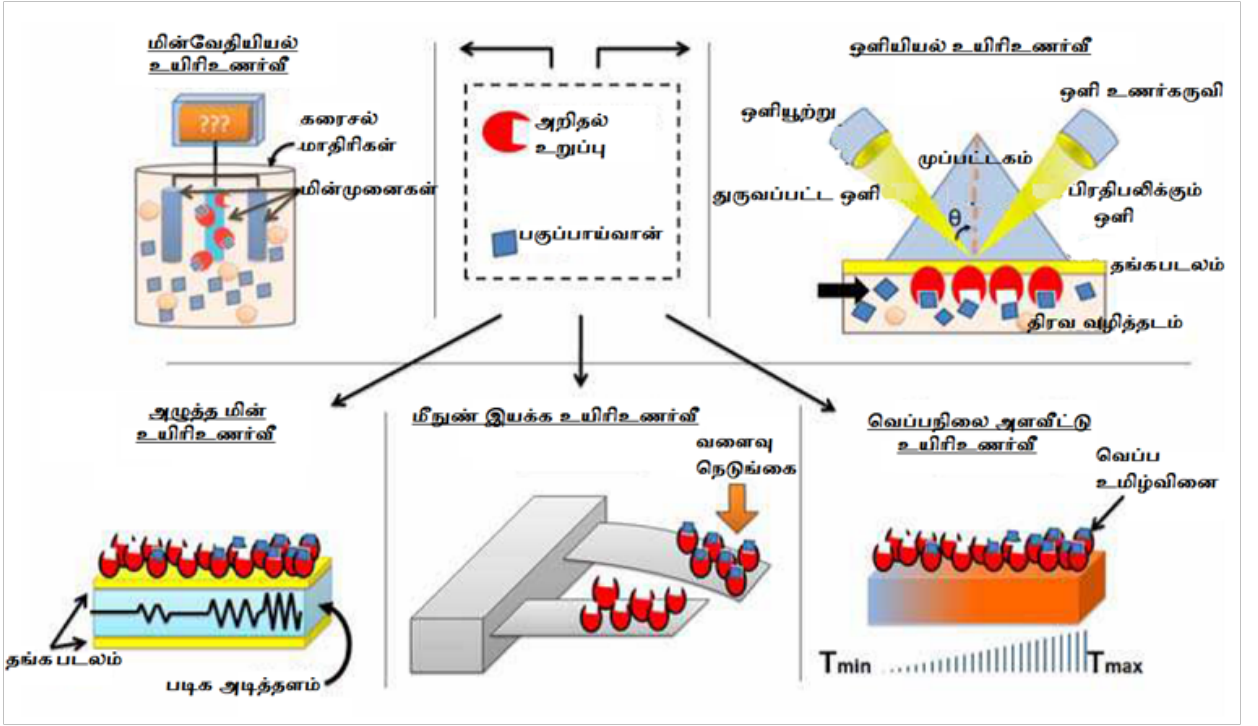
படம் 7-இல் 1) பொருத்தப்பட்ட நுண்ணெடுங்கை வரிசை அளவீட்டு அலகு, 2) செங்குத்து குழி மேற்பரப்பு உமிழும் லேசர்கள் (vertical cavity surface emitting lasers - VCSEL) உள்ள ஒளியியல் அளவீட்டு அமைவு மற்றும் நிலை-உணர்திறன் கண்டுபிடிப்பான் (position sensitive detector - PSD), 3) தரவு செயலாக்கம் மற்றும் கையகப்படுத்தல், 4) திரவம் இணைக்கப்பட்ட அடைப்பான் தேர்ந்தெடுப்பான்.

5.4. பிற முறைகள்

- வெப்ப உயிரிணர்வீ

- வெப்ப எதிர்வினை
- வெப்பப் பரப்புக்கவர்ச்சி
- காந்த உயிரிணர்வீ
- மேற்பரப்பு கடத்துத்திறன் உயிரிணர்வீ
- எலக்ட்ரோலைட் கடத்துத்திறன்

படம் 8-இல் பிறமுறை உயிரிணர்வீக்களின் செயல்பாட்டுக் கொள்கைகள் விளக்கப்பட்டுள்ளன.



படம் 8: பிறமுறை உயிர்-உணர்வீக்களின் செயல்பாட்டு கொள்கைகள்

6. பகுப்பணுக்களின் அடிப்படையில் உயிரி உணர்வீக்களின் வகைகள் [15, 16]

பகுப்பணுக்களின் அடிப்படையில் உயிரி-உணர்வீக்களை பின்வருமாறு வகைப்படுத்தலாம். அவையாவன:

6.1. நொதி மின்முனை உயிரி-உணர்வீ

ஒரு மின்முனையின் மேற்பரப்பில் நொதிகள் அசைவற்று உள்ளன. நொதி வினைத்திறன் காரணமாக மின்சாரம் உற்பத்தி செய்யப்படுகிறது. இந்த மின்சாரத்தை அளவிடுவதன் மூலம் குறிப்பிட்ட உயிரியினை அளவிடலாம்.

6.2. நொய் எதிர்ப்பு உயிரி-உணர்வீ

இதில் பிரபொருளேதிரிகள் பயன்படுத்தப்படுகின்றன. பிரபொருளேதிரி-எதிரியாக்கி பிணைக்கப்படும்போது அதில் ஏற்படும் நிரை மாற்றத்தை கண்டறிந்து குறிப்பிட்ட உயிரியினம் அளவிடப்படுகிறது.

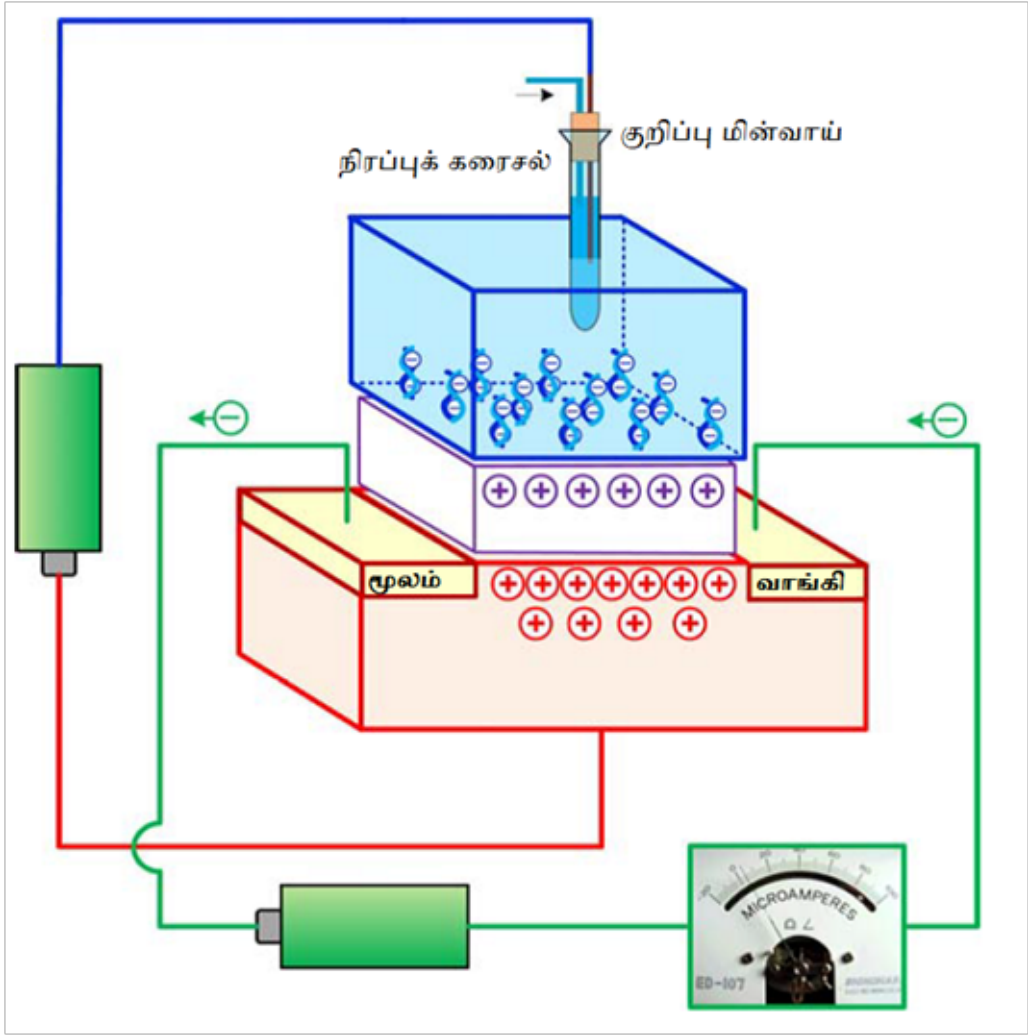
6.3. டிஎன்ஏ உயிரி-உணர்வீ

டிஎன்ஏ உயிரி-உணர்வீ, ஒரு சாதாரண புல

விளைவு டிரான்சிஸ்டரை கொண்டுள்ளது. இது, ஒரு மூல முனையம், ஒரு வடிகால்/வாங்கி முனையம், ஒரு மின்தடம், மற்றும் ஒரு மின்கடத்தா-வாயில் முதலியவற்றை தன்னகத்தே கொண்டுள்ளது. இதில், மின்கடத்தா-வாயில் இணைப்புக்குப் பதிலாக, ஒரு உயிர்-செயலி சவ்வு மின்கடத்தா-வாயில் மேல் வைக்கப்படுகிறது.

மேலும், இதில் குறிப்பு-மின்திரவம் மற்றும் குறிப்பு-மின்முனை சேர்க்கப்படுகிறது. இலக்கு டி.என்.ஏ மூலக்கூறுகள், உயிர்-செயலி சவ்வினால் கவரப்படும்போது, மின்தடத்தில் ஒரு எதிர்ப்பு ஏற்படுத்தப்படுகின்றது. இதனை வடிகால்/வாங்கி முனையத்தின் மின்சார மாற்றமாக கண்டறியலாம். இது மின்கடத்தா-வாயில் மின்னழுத்தத்தின் ஒரு மாற்றத்திற்கு சமமானதாக கருதப்படுகிறது.

படம் 9-இல் ஒரு டிஎன்ஏ உயிரி-உணர்வீயின் செயல்பாட்டு அமைவு காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 9: டிஎன்ஏ உயிரிஉணர்வீயின் செயல்பாட்டு அமைவு

6.4. நுண்ணுயிர் உயிரிஉணர்வீ

இதில் நுண் உயிரணுக்களை உணர்வீக்களாகப் பயன்படுத்தப்படுகின்றன.

7. அணியக்கூடிய உயிரிஉணர்வீக்கள்

அணியக்கூடிய உயிரிஉணர்வீக்கள் பொதுவாக அணியக்கூடிய பொருட்கள் மற்றும் உயிரிஉணர்வீக்களின் ஒரு கலவையாகும். இது பெரும்பாலும் உடம்பில் அணிந்து கொள்ளக்கூடிய பொருட்களால் ஆனது [17]. எ.கா. ஸ்மாண்ட்வாட்ச்கள், துணிகள், துணிப்பட்டைகள், ஓட்டும் பொட்டுகள், கண்ணாடிகள், மோதிரங்கள் போன்றவை. உயிரிஉணர்வீக்கள், ஒரு உயிரியல் உணர்வீ, ஆற்றல்-மாற்றி, காட்சித்திரை

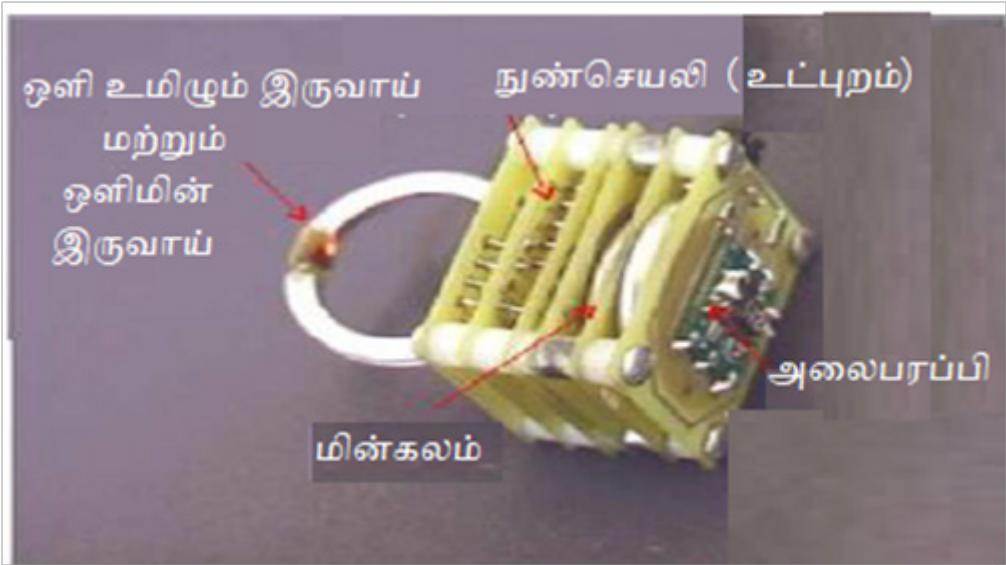
மற்றும் ஒரு உயிரியல் உறுப்பு ஆகியவற்றால் உருவாக்கப்பட்ட ஒரு சாதனம் ஆகும். இங்கே உயிரியல் உறுப்பு ஒரு பிரபொருளேதிரி, நொதி அல்லது ஒரு நியூக்ளிக் அமிலமாக இருக்கலாம். இதில் உயிரியல் கூறுகள் பகுப்பணுவுடன் வினைபுரிந்து இதன் உயிரியல்-ரீதியான பதில்களை ஆற்றல்-மாற்றி சமிக்கருயாக மாற்றுகிறது. பயன்பாடுகளைப் பொறுத்து, உயிரி உணர்வீக்களை, நோய்-ஏதிர்ப்பு, ஒளிமின்முனை, உயிரிச்சில்லு, குளுகோமீட்டர்ஸ் மற்றும் உயிரிகணிணி போன்ற பெயர்களால் அவைகள் அழைக்கப்படுகின்றன. உயிரிஉணர்வீ காட்சித்திரை முடிவுகளை காட்சிப்படுத்த பயன்படுகிறது. காட்சித்திரைதான் அணியக்கூடிய உயிரி

உணர்வீயின் மிகவும் விலையுயர்ந்த பகுதியாக கருதப்படுகிறது.

7.1. மோதிர உயிரிணர்வீ

மோதிர உயிரிணர்வீ ஒரு துடிப்பு ஆக்சிஸன் உணர்வீயை பயன்படுத்தி ஒரு தடையற்ற ஆக்ஸிஜன் செறிவூட்டல் மற்றும் இதய துடிப்பினை தொடர்ந்து கண்காணிக்க உதவுகிறது. இது மின்ஏற்றி (transmitter), ஒளிஇருமுனை (photodiode), ஒளி உமிழும் இருமுனை (LED) மற்றும் நுண்செயலி போன்ற சாதனங்களைக் கொண்டுள்ளது. இதயத்தின் ஒவ்வொரு சுருங்குதலின் போதும் ஒளி

உமிழும் இருமுனையின் ஒளியில் ஏற்படும் மாற்றத்தினை ஒளிஇருமுனையின் தடையில் ஏற்படும் மாற்றத்திலிருந்து கண்டறியலாம். ரத்த ஓட்டத்தை பொருத்து உடம்பிற்கு கிடைக்கும் இரத்தத்தின் அளவு வேறுபடுகிறது. இதையொட்டி, மோதிரம் அணிந்திருக்கும் விரல் வழியாக செல்லும் இரத்தத்தின் அளவு மற்றும் ஒளியியல் அடர்த்தி மாறுபாடு அடைகின்றது. இதிலிருந்து, ஒளிஇருமுனையின் மாறுகின்ற மின்தடை அளவிடப்பட்டு வரைபடமாக காண்பிக்கப்படுகிறது. படம் 10-இல் ஒரு மோதிர உயிரிணர்வீயின் தோற்றம் காண்பிக்கப்பட்டுள்ளது.



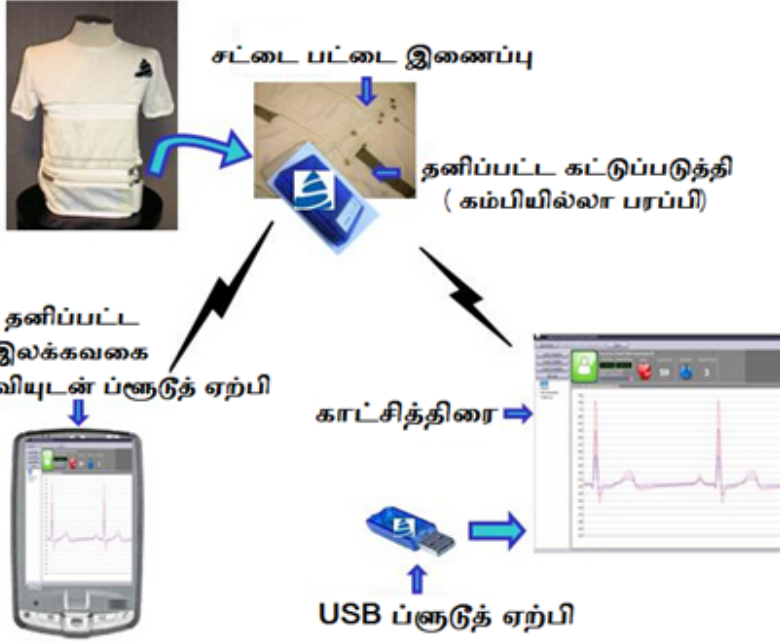
படம் 10: மோதிர உயிரிணர்வீயின் தோற்றம்

7.1. திறன்மிகு சட்டைகள்

திறன்மிகு சட்டை ஒளியியல் இழைகள் பயன்படுத்தி அணியக்கூடிய உயிரிணர்வீக்கள் கொண்ட தாய்ப்பலகை (மதர்போர்டு) ஆகும். இதிலுள்ள சிறப்பு உணர்வீக்களை பயன்படுத்தி உடலின் முக்கிய அறிகுறிகள் மற்றும் துப்பாக்கி குண்டுகளால் ஏற்படும் காயங்களையும் கண்டறியலாம். திறன்மிகு சட்டை தொழில்நுட்பம்

நோயாளிகளுக்கு ஒரு தங்குதடையற்ற மற்றும் தொடர் கண்காணிப்புக்கு வழி வகுக்கிறது. எனவே, இது உயர் இரத்த அழுத்தம், இதய நோய், நீரிழிவு நோய், நாள்பட்ட மூச்சுக்குழாய் அழற்சி மற்றும் மனஅழுத்தம் போன்ற நோய் மேலாண்மையில் முக்கிய பங்கு வகிக்கிறது. படம் 11-இல் ஒரு திறன்மிகு சட்டையின் செயல்படும் தொகுதி காட்டப்பட்டுள்ளது.

ஒருங்கிணைந்த உணர்வீக்கள் மற்றும் கடத்தும் திறன் மேம்படுத்தப்பட்ட சட்டை அமைப்பு இழை கட்டத்துடன் சட்டை



படம் 11: திறன்மிகு சட்டையின் செயல்படும் தொகுதி

8. பாதுகாப்பு மைய (Point-of-Care (POC)) உயிரிஉணர்வீக்கள்

□ POC உயிரிஉணர்வீக்கள் சரியான-நேரத்தில், விரைவான, தடையற்ற, மற்றும் உயர் தேர்ந்தெடுப்பு மற்றும் உணர்திறன் கொண்ட பலவகைப்பட்ட நோய் கண்டறிதலை [18] அனுமதிக்கிறது.

□ POC அமைப்புகள் பல்வேறு உயிரி உணர்வீக்களைக் கொண்டுள்ளன. இவை அணியக்கூடிய அல்லது உடலின் உட்புறத்தில் பொருத்தக்கூடிய வகையில் வடிவமைக்கப்பட்டு இருக்கின்றன. மேலும், இவை இதய துடிப்பு, ஆக்ஸிஜன் செறிவு, பிளாஸ்மா புரோட்டின் சுயஅளவீடுகளில் ஏற்படும் மாற்றங்கள் மற்றும் பல உயிரியக்க-மாதிரிகள் ஆகியனவற்றின் செறிவுகளை அளவிடுவதற்கான திறன் கொண்டவை.

□ தனிப்பட்ட இலக்கவகை உதவிக்

(Personal Digital Assistance - PDA) கருவி போன்ற மத்திய தரவு கையகப்படுத்தல் முனையுடன் கம்பி அல்லது கம்பியில்லா இணைப்பு மூலம் தகவல் தெரிவிக்கப்படுகிறது. இதன் தொடர்ச்சியாக, உணர்திறன் சமிக்ஞைகளை ஒரு மருத்துவ மையத்திற்கு அனுப்ப முடியும்.

□ POC அமைப்புகள் ஒருங்கிணைந்த அமைப்புகளாக கருதப்படுகின்றன. இவை பல்வேறு வகையான மருத்துவ உயிரி-மாதிரி களுடன் மருத்துவ ஆய்வகங்கள், மருத்துவரின் அலுவலகம் மற்றும் பல்வேறு வகையான இடங்களில் பரிசோதனை செய்யக் கூடிய வகையில் வடிவமைக்கப்பட்டிருக்கின்றன.

□ ஒரு உயிரிஉணர்வீ என்பது ஒரு உயிரி-பகுப்பாய்வு கருவியாகும். இதில், ஒரு உயிரியல் பொருள் அல்லது ஒரு உயிரி-மாதிரி (எ.கா., பிரபொருளேதிரிகள் அல்லது நியூக்ளியிக் அமிலங்கள்) உடன் இணைந்திருக்கும்

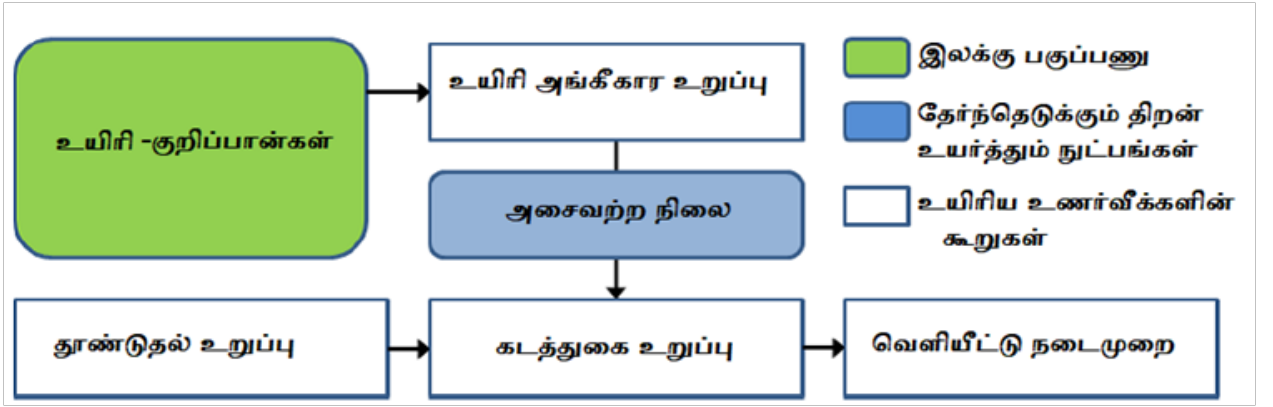
அல்லது ஒரு உடற்கூறு வேதியியல் ஆற்றல்-மாற்றி அல்லது நுண்ணுயிரி ஆற்றல்-மாற்றி அமைப்புடன் ஒருங்கிணைக்கப்பட்டிருக்கும்.

□ ஆற்றல்-மாற்றியானது ஒளியியல், மின்வேதியியல், வெப்பவியல், அழுத்தமின்சாரம் அல்லது காந்தம் ஆகியவையின் அடிப்படையைக் கொண்டு இருக்கலாம்.

□ ஒரு உயிரிஉணர்வீ (1) உயிர்-

அங்கீகார உறுப்பு (உயிரி-வாங்கி), (2) ஆற்றல்-மாற்று உறுப்பு, (3) தூண்டுதல் உறுப்பு மற்றும் (4) வாசிப்பு நடைமுறை போன்ற முக்கிய உறுப்புகளை கொண்டிருக்கும். இருப்பினும், சில உயிரிஉணர்வீக்களில் தூண்டுதல் உறுப்பு இருக்காது.

□ படம் 12-இல் ஒரு பாதுகாப்பு மைய (Point-of-Care (POC)) உயிரிஉணர்வீயின் தொகுதி வரைபடம் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது.



படம் 12: பாதுகாப்பு மைய (Point-of-Care (POC)) உயிரிஉணர்வீயின் தொகுதி வரைபடம்

9. நுண்மின்சூயந்திர (MEMS) / மீமின்சூயந்திர (NEMS) உயிரிஉணர்வீக்கள் 819-27^o

MEMS அடிப்படையிலான நுண்வடிவமைப்பு தொழில்நுட்பத்தைப் பயன்படுத்தி குறைவான அளவு, எடை மற்றும் மின்-நுகர்வு கொண்ட உயிரிஉணர்வீக்களை கட்டமைக்கிறார்கள். மூன்று-பரிமாண கட்டமைப்புகளின் கட்டுமானம் மின்வேதியியல், வேதியியல் உயிரிஉணர்வீக்கள் மற்றும் நுண் அமைவு (மைக்ரோசிட்ம்ஸ்) ஆகியவற்றிற்கு மிகவும் விரும்பத்தக்கதாகும். ஏனென்றால், உயிரிஉணர்வீக்களை தொடர்புடைய மின்னணு சுற்றுடன் ஒருங்கிணைப்பது மிகவும் எளிதாகும். உயிரிஉணர்வீக்களில் மீநுண்பொருட்களான குறைக்கடத்திகள், கடத்தும் பாலிமர் மீநுண்கம்பிகள் மற்றும் மீநுண்துகள்கள் (கார்பன் மீநுண்குழாய்கள், சிலிக்கான் மீநுண்துகள்கள்,

உன்னதமான உலோக-மீநுண்துகள்கள், தங்க மீநுண்கூடுகள், குவாண்டம் புள்ளிகள் மற்றும் பாலிமெரிக் மீநுண்துகள்கள்) ஆகியவற்றைப் பயன்படுத்தி விரைவாக கட்டமைகிறார்கள். இதனால், உயர்தர மேற்பரப்பு-பருமன் விகிதம், நவீன மின்னோட்ட-ஒளியியல் பண்புகள், அதிகரிக்கப்பட்ட-வினையூக்கி செயல்பாடு மற்றும் மேம்படுத்தப்பட்ட எலக்ட்ரான்-பரிமாற்றம் போன்ற மேம்பட்ட பகுப்பாய்வு பண்புகள் கொண்ட உயிரிஉணர்வீக்கள் வடிவமைக்க முடியும்.

10. வணிக அடிப்படையிலான மருத்துவ உயிரிஉணர்வீக்கள்

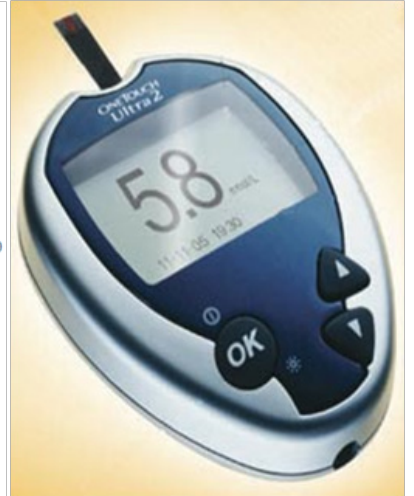
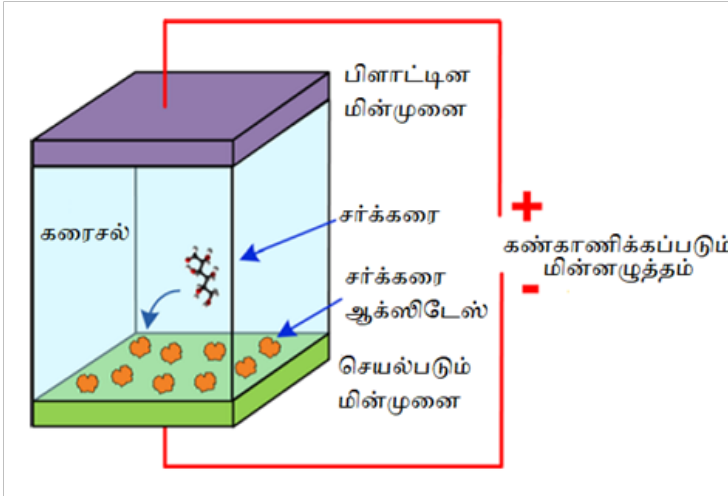
பெரும்பாலான குளுக்கோஸ் உயிரி உணர்வீக்கள், மின்வேதியியல் முறையைப் பயன்படுத்துகின்றன. இரத்தத்தில் உள்ள குளுக்கோஸ் நொதி மின்முனையில் உள்ள

குளுக்கோஸ்-ஆக்ஸிடேஸுடன் வினை புரிகிறது. இப்போது, நொதியானது இடைநிலை-வினைபுரிவானுடன் சேர்ந்து மீண்டும் ஆக்ஸிஸன் ஏற்றம் அடைகிறது. மின்முனையில் ஏற்படும் வினையினால், இடைநிலை-வினைபுரிவான் மீண்டும் ஆக்ஸிஸன் ஏற்றம் அடைந்து ஒரு மின்னோட்டத்தை உற்பத்தி செய்கிறது. மின்முனை வழியாக செல்லும் மின்னூட்டத்தைப் பொருத்து குளுக்கோஸின் அளவு கணிக்கப்படுகிறது.

10.1. கையடக்க இரத்த பகுப்பாய்வு அமைப்பு

விரைவான, துல்லியமான மற்றும் ஆய்வக-தர முடிவுகளை நிமிடங்களில் முடிவெடுக்கும் செயல்முறையை கொண்ட கையடக்க

இரத்த பகுப்பாய்வு அமைப்பை i-STAT என்ற நிறுவனம் அறிமுகப்படுத்தியுள்ளது. இதில் அடி மூலக்கூறு தொகுப்பாக சிலிகான் பயன்படுத்துகிறது. தொடர்புடைய மின்னணுவியல் சுற்றுக்கள் கையடக்க சாதனத்தில் வைக்கப்பட்டுள்ளது. மேலும், உணர்வீக்கள் மெல்லியபடல மின்முனைகளாக நுண் வடிவமைக்கப்பட்டுள்ளன. இதிலிருந்து உண்டாகும் மின்சமிக்கைகள், மின்னோட்ட அல்லது மின்னழுத்த அல்லது மின்கடத்தல் சுற்றுக்கள் மூலம் அளவிடப்படுகின்றன. படம் 13 மற்றும் படம் 14-இல் வணிக அடிப்படையிலான மருத்துவ உயிரிணர்வீக்கள் காட்டப்பட்டுள்ளன.



படம் 13: குளுக்கோஸ் உயிரிணர்வீ மற்றும் அதன் செயல்படும் கொள்கை



கருசோதனை உயிரிணர்வீ பட்டை



தொற்றுவிவாதி உயிரிணர்வீ

படம் 14: கருசோதனை மற்றும் தொற்றுவிவாதி உயிரிணர்வீக்கள்

11. முடிவுரை

வளரும் நாடுகளில் எச்.ஐ.வி/எய்ட்ஸ் மற்றும் காசநோய் போன்ற நோய்களால் மக்கள் பாதிப்பு அடைந்து ஒவ்வொரு ஆண்டும் 1.8 மில்லியன் மக்கள் உயிர் இழக்கிறார்கள். மேலும் உலக மக்கள்தொகையில் மூன்றில் ஒரு பகுதியையும் பாதிக்கிறது. சமீப ஆண்டுகளில் 1.4 மில்லியன் இறப்புக்கள் உலகளாவிய அளவில் நடைபெற்று இருக்கிறது என்பது உலக சுகாதார நிறுவனத்தின் (WHO) 2012-ஆம் ஆண்டிற்கான புள்ளி விவரமாகும். கூடுதலாக, 2.5 மில்லியன் இறப்புக்கள் வயிற்றுப்போக்கு நோய்த் தொற்றுகளாலும், கிட்டத்தட்ட 800,000 பேர் மலேரியாவிலும் இறந்திருக்கிறார்கள். 2008-ம் ஆண்டில் 57 மில்லியன் உலகளாவிய இறப்பு விகிதத்தில், 36 மில்லியன் (63%) தொற்று அல்லாத நோய்கள் காரணமாக இறந்திருக்கிறார்கள். இது, வரும் காலங்களில் அதிகரிப்பதற்கான வாய்ப்புகள் உள்ளதாக கணிக்கப்பட்டு இருக்கிறது. இதற்கான முக்கிய தீர்வுகளான, தொழில்நுட்பம் வழியாக பொருளாதார-ரீதியாக சாத்தியமான தீர்வுகளை வழங்குதல், உயிரிஉணர்வீக்கள் அடிப்படையாக கொண்ட நோயறிதல் முறைகளை வழங்கல் மற்றும் நுகர்வோர் பொருட்கள் மிக எளிதாக கிடைக்கப்பெறுதல் ஆகியவை முக்கிய பங்கு வகிக்கின்றன.

தற்போது, நீரிழிவுக்கான குளுக்கோஸ் உயிரிஉணர்வீக்கள் நோய் மேலாண்மை மீது மிக அதிகமான தாக்கத்தை ஏற்படுத்தி யுள்ளன. வளர்சிதை மாற்றத்திற்கான உயிரிஉணர்வீக்கள் மற்றும் சிறுநீரக நோய்களுக்கான உயிரிஉணர்வீக்கள் போன்றவை வேகமாக வளர்ந்து வரும் வயதானவர்களின் பிரச்சனைகளுக்கு

முக்கிய தீர்வாக உணரப்படுகிறது. ஒளி-இழை உயிரிஉணர்வீக்கள், உயிரிஉணர்வீ வளர்ச்சியில் முக்கிய பங்கு வகிக்கின்றன. ஏனெனில், அவை எளிதில் நுண்ணியவடிவில் வடிவமைக்கப்பட்டு பல்வேறு இலக்கு-கலவைகளில் ஒருங்கிணைக்கப்பட முடியும். இந்த உயிரிஉணர்வீ வகைகள் கடந்த ஆண்டுகளில் பெரிய எண்ணிக்கையிலான ஆராய்ச்சிகளின் இலக்காக இருந்தன. இந்த முயற்சியில், பரந்த அளவிலான பயன்பாட்டுத்துறை பகுப்பாய்வுகளில் விரைவான, தொலைநிலை, இன்லைன் மற்றும் ஆன்-லைன் தீர்மானத்தை செயல்படுத்துவதற்கான பல வழிகளை வழங்குகின்றன. மேலும், இவை தொடர்ச்சியான வளர்ச்சி அடைந்து வருகின்றன. இதன் விளைவாக, நுண்-கட்டமைப்பு, செயல்திறன், ஊடுருவல் தன்மை, மீளும் தன்மை, பதிலளிப்பு நேரம், மறுசெயற்திறன், உணர்திறன் மற்றும் தெரிவுநிலை போன்ற காரணிகளை அதிகரிப்பதற்கு முக்கியத்துவம் தரப்படுகின்றன. மேலும், உருமாற்ற-நெறிமுறைகளை மேம்படுத்த அதிக முக்கியத்துவம் அளிக்கப்படுகிறது.

12. எதிர்கால தீர்வுக்கம்

அடுத்த தலைமுறை உயிரிஉணர்வீக்களை உருவாக்குவதற்கான ஆராய்ச்சியின் முக்கிய இலக்குகளான, புதிய உயிரி-அசைவறு உத்திகள், புதிய தொழில்நுட்ப அணுகுமுறைகள், புதிய வகை மீநுண் மற்றும் நுண்ணிய பொருட்கள் மற்றும் உணர்வீக்களின் பண்புகளை அதிகரிக்க மீநுண்-அளவில் உணர்வீ-பொருட்களின் பண்புகளை அதிகரித்தல் போன்றவை கண்டறியப்பட்டுள்ளன. எனவே, இவை அனைத்தும் எதிர்காலத்தில் பல சவாலான சாத்தியக்கூறுகளைக் கொண்ட இந்த துறை சார்ந்த ஆராய்ச்சியின் பரப்பளவை மேம்படுத்தும் அளவுருக்களாக கருதப்படுகின்றன.

13. குறிப்புரை :

1. Thevenot DR, Toth K, Durst RA, Wilson GS (1999) Pure Appl Chem 71:2333-2348
2. Vo-Dihn T, Cullum B (2000) Fresenius J Anal Chem 366:540-551
3. Byfield MP, Abuknesha, RA (1994) BiosensBioelectron 9:373-400
4. Thomas Ming-Hung Lee: Over-the-Counter Biosensors: Past, Present, and Future. Sensors, 8, 5535-5559(2008).
5. Collings AF and Frank Caruso: Biosensors: Recent Advances. Rep. Prog. Phys 60, 1397-1445 (1997).
6. Mohd. Ansari and Chongdu Cho: Deflection, Frequency, and Stress Characteristics of Rectangular, Triangular, and Step Profile Microcantilevers for Biosensors. Sensors, 9, 6046-6057 (2009).
8. Arvind Sai SarathiVasan, Ravi Doraiswami and Michael Pecht: Biocompatible Polymer Composite Materialfor Highly Sensitive Point-of-Care BioMEMS Microcantilever sensors. Proc. SMTAI 2010, 279-288 (2010).
9. Nathalie Zammattéo, Laurent Jeanmart, Sandrine Hamels, StephaneCourtois, Pierre Louette, Laszlo Hevesiand Jose Remacle: Comparison between Different Strategies of Covalent Attachment of DNA to GlassSurfaces to Build DNA Microarrays. Anal. Biochem., 280, 143-150 (2000).
10. Arnold M.A. Meyerhoff M.E. Recent Advances in the Development and Analytical Applications of Biosensing Probes. Crit. Rev. Anal. Chem. 1988; 20: 149-196.
11. Amine, A., Mohammadi, H., Bourais, I., Palleschi, G., 2006. Biosens. Bioelectron. 21, 1405-1423.
12. Joseph Wang, Electrochemical Glucose Biosensors, Chem. Rev. 2008, 108, 814-825
13. Thevenot, D. R.; Toth, K.; Durst, R. A.; Wilson, G. S. Electrochemical biosensors: recommended definitions and classification. Biosensors & Bioelectronics 2001, 16(1-2), 121-131. Nanomedicine 401
14. Bakker, E.; Pretsch, E. Potentiometric sensors for trace-level analysis. Trac-Trends in Analytical Chemistry 2005, 24(3), 199-207.
15. Madhura Nayak, Akhil Kotian, Sandhya Marathe, Dipshikha Chakravorty. Detection of microorganisms using biosensors-A smarter way towards detection techniques. Biosensors and Bioelectronics 25 (2009) 661-667

16. Liang Su, Wenzhao Ji, Changjun Hou, Yu Lei. Microbial biosensors: A review. *Biosens. Bioelectron.* 26 (2011) 1788-1799.
17. Mark Tamsin, *Wearable Biosensor Technologies*, *International Journal of Innovation and Applied Studies* 13:697-703 · January 2015.
18. Wang, J. Electrochemical biosensors: Towards point-of-care cancer diagnostics. *Biosensors & Bioelectronics* 2006, 21(10), 1887-1892.
19. Taton T A, Lu G and Mirkin C A 2001 Two-color labeling of oligonucleotide arrays via size selective scattering of nanoparticle probes *J. Am. Chem. Soc.* 123 5164-5
20. Cui, Y. Wei, Q. Park, H. Lieber, CM. Nanowire nanosensors for highly sensitive and selective detection of biological and chemical species. *Science.*293:12, 89 - 92 (2001).
21. Patolsky, F.; Timko, B. P.; Zheng, G. F.; Lieber, C. M. Nanowire-based nanoelectronic devices in the life sciences. *MRS Bulletin* 2007, 32(2), 142-149,

சாய - உணர்ச்சிப்பாடுடைய சூரிய மின்கலன்களின் உணர்திறன் பயன்பாட்டிற்காக 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொபீ 2 - ஈனோய்க் அமிலத்தின் தயாரிப்பு மற்றும் பண்புகள்

கோட்டிஸ்வரன் சண்முகம்*, மு. செந்தில்பண்டியன், பெ. இராமசாமி
எஸ். எஸ். என் ஆய்வு மையம், எஸ். எஸ். என் பொறியியல் கல்லூரி, சென்னை-603110, தமிழ்நாடு.
*மின்னஞ்சல்- kotties555@gmail.com

ஆய்வுச்சுருக்கம்

பினைல் தொகுதி-இணைக்கப்பட்ட ஒலிகோயினின் சாயமான 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோபினைல்) புரொபீ 2-ஈனோய்க் அமிலம் இரசாயன முறை மூலம் உருவாக்கப்பட்டது. குழாய் நிற வண்ணப்பிரிகை மூலம், உருவாக்கப்பட்ட சாயம் சுத்தப்படுத்தப்பட்டது. சாயத்தின் கட்டமைப்பு புரோட்டான் அணு காந்த அதிர்வு மற்றும் கார்பன் அணு காந்த அதிர்வு பகுப்பாய்வு மூலம் உறுதி செய்யப்பட்டது. ஃபுரியர் மாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலையின் மூலம் சாயத்தின் செயல்பாட்டுக் குழுக்கள் அடையாளம் காணப்பட்டது. சுழற்சி மின்னழுத்த அளவியல் பகுப்பாய்விலிருந்து, மின் அணு பரிமாற்ற செயல்பாட்டின் மாறுபாடு பற்றிய தகவல்கள் பெறப்பட்டன. அதிகளவு நிரம்பிய மூலக்கூறுகளின் சுற்றுப்பாதை மற்றும் குறைந்தளவு நிரம்பாத மூலக்கூறுகளின் சுற்றுப்பாதை மதிப்புகளை தீர்மானிக்க எதிர்மின்முனை மற்றும் நேர்மின்முனை ஏற்ற/ஒடுக்க ஆற்றல் பயன்படுத்தப்பட்டது. சாயத்தின் சுழற்சி மின்னழுத்த அளவியல், சில்வர்/ சில்வர் குளோரைடு ஆகியவற்றை குறிப்பு மின் முனையாகவும், கண்ணாடி கார்பனை வேலைசெய்யும் மின் முனையாகவும், பிளாட்டினத்தை எதிர் மின்முனையாகவும் பயன்படுத்தி அறை வெப்பநிலையில் 100 மிவோ என்ற வருடு வீதத்தில் அளவிடப்பட்டது. புற ஊதா அகச்சிவப்பு கட்டிலனாகும்-நிறமாலை மூலம், அதிகபட்ச உறிஞ்சுதல் பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது மற்றும் மோலார் பிரிகை குணகமானது அதிகபட்ச உறிஞ்சுதல் மதிப்பைப் பயன்படுத்தி கணக்கிடப்பட்டது. சாயத்தின் உமிழ்வுத் தன்மையைக் கண்டறிய 430 நாமீ தூண்டுதல் அலைநீளத்தில் ஒளிர்வு நிறமாலை பயன்படுத்தப்பட்டது. வகைப்பாட்டு பண்பறி பகுப்பாய்வு மற்றும் வகைப்பாட்டு வெப்ப பகுப்பாய்வு மூலம் சாயத்தின் உருகு நிலை மற்றும் சிதைவு நிலை கண்டறியப்பட்டது. வெண்வெள்ளி ஈருயிரகம் (P-25) யை நேர்மின்வாயாகவும், தயாரித்த சாயத்தை உணர்த்தியாகவும், 1/1 3- யை மின்பகுளியாகவும் மற்றும் பிளாட்டினத்தை எதிர்மின்முனையாகவும் கொண்டு சூரிய மின்கலம் உருவாக்கப்பட்டது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோபினைல்) புரொபீ 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தை அடிப்படையாகக் கொண்ட சூரிய மின்கலத்தின் மொத்த ஆற்றல் மாற்ற திறன் 1.76% ஒளிமின்னழுத்த அளவுருக்கள் முறையே திறந்த மின்னழுத்தசுற்று - 0.67 வோ, குறுக்குவெட்டு மின்னோட்ட அடர்த்தி - 4.63 மிஆ/செ. மீ² மற்றும் நிரப்புக்காரணி-0.56. சாயத்தின் ஒளி நிலைப்புத்தன்மையானது பல்வேறு ஒளிக்கதிர்வீச்சு செலுத்துவதற்கு முன்பாகவும் மற்றும் ஒளிக்கதிர்வீச்சு செலுத்திய பிறகும் புற ஊதா அகச்சிவப்பு கட்டிலனாகும்-நிறமாலை கொண்டு பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது.

முக்கிய வார்த்தைகள் : உறிஞ்சுதல் நிறமாலை; சுழற்சி மின்னழுத்த அளவி; சூரிய மின்கலம் உருவாக்கம்; ஒலிகோயின் சாயம்; சக்தி மாற்றும் திறன்.

1. முன்னுரை

சாய உணர்திறன் சூரிய மின்கலங்கள் (DSSCகள்) கல்வி மற்றும் தொழிற்துறை சமூகங்களுக்கான கணிசமான ஆர்வத்தை ஈர்த்துள்ளன. 1991 இல் கிராட்ஸ்ல் மற்றும் சக ஆராய்ச்சியாளர்கள் “சுற்றுச்சூழல் மாசுபாடு இல்லாமல் சூரிய ஒளியை மின்சக்தியாக மாற்றும் திறன் காரணமாக சாய உணர்திறன் சூரிய மின்கலங்கள் தீவிர ஆராய்ச்சிக் களமாக இருக்கின்றன” என அறிவித்தனர் [1]. DSSC இல், உணர்த்திகள் ஒரு முக்கிய பங்கைக் கொண்டு இருப்பதுடன், சிறந்த கண்ணுறு ஒளிப்பகுதியை உறிஞ்சுதலையும், அதிக ஒளி அறுவடை மற்றும் வேகமாக எலக்ட்ரான் செலுத்துதல்த திறன் ஆகியவற்றையும் கொண்டிருக்க வேண்டும் [2-5]. DSSC யைத் கட்டமைப்பதற்கு நான்கு வெவ்வேறு பகுதிகள் உள்ளடங்கியிருக்கின்றன, ஆனால் அதிகமான ஒளி அறுவடை மற்றும் அதிகமான ஏலக்ட்ரான்கள் உருவாக்கத்தில் உணர்த்திகள் பகுதி முக்கிய அம்சமாகும். மேலும், செமிகண்டக்டர் உலோக ஆக்சைடு / உணர்திறன் / எலக்ட்ரோலைட் இடைமுகத்தில் முக்கிய எலக்ட்ரான் பரிமாற்ற செயல்முறைகளை கட்டுப்படுத்த சாய மூலக்கூறின் கட்டமைப்பு காட்டப்பட்டுள்ளது. புதிய திறனுள்ள சாயங்களை மேம்படுத்தி அதிகமான சூரிய ஆற்றலை மின்னாற்றல்லாக மாற்றுவதற்க்கான பல முயற்சிகள் சமீபத்தில் மேற்கொள்ளப்பட்டுள்ளது.

பல ஆண்டுகளாக, ருத்தினிய அடிப்படையிலான சாய-உணர்த்திகள் DSSC களின் சாம்பியன்களாக இருந்தன, அவற்றில் சில 12% க்கும்மேலானசெயல்திறனைக்காட்டுகின்றன[6]. மேலும், அதிக சக்தி மாற்றும் திறனுடைய, மற்றும் அதிக நிலைப்புத்தன்மையுடைய DSSCகளும் ருத்தினியம் அடிப்படையிலான உணர்த்திகளைப் பயன்படுத்தி உருவாக்கப்பட்டுள்ளன. ருத்தினியம் பூமியில் ஏராளமான கிடைக்காததும் மாற்று உணர்த்திகளைத் தேடுவதற்க்கு மிகவும் முக்கியமான காரணம் ஆகும். சில ருத்தினியத் தனிமங்கள் பரந்த உறிஞ்சுதல் திறனைக் கொண்டிருந்தாலும், அவை சிறிய மோலார் அழிவுக் குணகமுடையது [7-9] மற்றும் சூரியக் கலங்களைச் உருவாக்கும்போது அதிக செலவுகளைக் கொண்டுள்ளன. இந்த சிக்கலைச் சமாளிக்க, கரிம ஒளி உணர்த்திகள் பயன்பாடு ஒரு பயனுள்ள மூலோபாயமாக

நிரூபிக்கப்பட்டுள்ளது. கரிம ஒளி உணர்த்திகள் தங்களது உறுதியான கட்டமைப்புகள், குறைந்த உற்பத்தி செலவுகள், எளிதான மற்றும் மிகவும் பல்துறை தொகுப்பு மற்றும் அதிக அளவிலான மோலார் அழிவு குணகங்களின் காரணமாக பெரும் ஆர்வத்தை ஈர்த்துள்ளனர். கூடுதலாக, கரிம ஒளி உணர்த்திகள் அதிக நிலைப்புத்தன்மையுடையவையாக உள்ளன. [10-11].

சமீபத்திய ஆண்டுகளில் உலோகமில்லாத கரிம உணர்த்திகள் அதிக கவனத்தை ஈர்த்துள்ளன, ஏனெனில் அவை நச்சற்றது, விலைமதிப்பற்ற உலோகம் இல்லாதது, மேலும் அவற்றின் பண்புகளும் எளிமையான கட்டமைப்பு மாற்றங்களால் எளிதில் சரிசெய்யப்படுகின்றன. இன்று வரை DSSC களுக்கான மிகவும் திறமையான கட்டமைப்பு உலோகம்-அல்லாத கரிம உணர்த்திகள் கொடையாளி-π பாலம்-ஏற்பிகட்டமைப்பு ஆகும். இந்த கட்டுமானத்துடன் புதிய சாய வடிவமைப்புகளை வடிவமைப்பது எளிது, உறிஞ்சுதல் நிறமாலை பகுதியை நீட்டிக்க, ஆற்றல் மட்டங்களை சரிசெய்ய மற்றும் உள் மூலக்கூறு சார்ஜ் மாற்றத்தை சரிசெய்ய முடியும். DSSC பயன்பாட்டிற்கான உணர்த்திகளைத் தேர்வு செய்யும்போது சாய மூலக்கூறுகளின் ஆற்றல்மட்ட அளவுகளைப் பற்றி கட்டாயம் அறிந்திருக்க வேண்டும். அதிகபட்சம் நிரப்பப்பட்ட மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் (HOMO) மதிப்பானது சுழற்சி மின்னழுத்த அளவியலின் தரவு அயனியாக்கம் செய்வதற்கு சாத்தியமான அளவீடு மூலம் நேரடியாக நிர்ணயிக்கப்படுகிறது மற்றும் குறைந்தபட்சம் நிரப்பப்படாத மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் (LUMO) மதிப்பானது உறிஞ்சுதல் ஸ்பெக்ட்ரலிலிருந்து கண்டறியப்படுகிறது. ஆற்றல் மட்டங்கள் சாய மூலக்கூறுகளின் ஒட்டுமொத்த நிலை மற்றும் சூழலை சார்ந்து இருக்கின்றன. கரைசலில், சாய மூலக்கூறுகள் கரைப்பானினால் சூழப்பட்டிருக்கின்றன, அடுக்குகளில் அவை ஒரே பொருள் மூலக்கூறுகளுடன் தொடர்பு கொள்கின்றன. சாய மூலக்கூறுகள் TiO₂ வின் மேற்பரப்பில் தொட்டுக்கொண்டு உள்ளது. சாய மூலக்கூறுகள் அவைகளுக்குள் ஒட்டிக்கொள்ளும் இந்த செயல்முறை அவைகளின் ஆற்றல் மட்டங்களை மேலும் பாதிக்கலாம்.

இன்றைய தேதி வரை DSSCயில் நான்கு வகையான உணர்த்திகள் பயன்படுத்தப்படுகிறது

(i) ருத்தினியம் வகைத்தனிமங்கள் 12% சூரிய செயல்திறனை கொடுத்துள்ளது. ருத்தினியம் வகைத் தனிமங்கள் பூமியில் ஏராளமானவை அல்ல, அது அதிக செலவுள்ளவையாகும், எனவே காலப்போக்கில் தொடர்ந்து செல்ல முடியாது. (ii) துத்தநாக-பார்பைரின் தனிமங்கள் 13% சூரிய செயல்திறனை கொடுத்துள்ளது [12-17]. ருத்தினியம் வகைத்தனிமங்களை ஒப்பிடும்போது துத்தநாக-பார்பைரின் தனிமங்கள் மிகவும் நன்றாக இருக்கிறது, ஆனால் கட்டமைப்பு சரிப்படுத்துதல் மற்றும் தயாரிப்பில் பல படிக்கள் உள்ளன. எனவே இந்த வகை சாயங்கள் DSSC இல் பயன்படுத்துவது சிக்கலானது. இது துத்தநாக-பார்பைரின் தனிமங்களின் சாயங்களின் முக்கிய குறைபாடு ஆகும். (iii) சைனான், கரோடீன், டானின், குளோரோஃபில், மாங்கொஸ்டீன் பெரிக்ரப் போன்ற பல இயற்கையான சாயங்கள் [18-23] DSSCகளில் பயன்படுத்தப்பட்டுள்ளன. ஆனால் இயற்கை சாய மூலக்கூறுகள் குறைந்த செயல்திறன் மற்றும் குறைவான உறுதிப்பாடு கொண்டுள்ளன. அந்த குறைபாடுகளுக்காக இயற்கை சாயங்கள் ஆராய்ச்சியாளர்களால் கவனம் செலுத்தப்படவில்லை. (iv) தற்போது, கரிம தனிமங்கள் அடிப்படையிலான DSSCகள் ஒட்டுமொத்த செயல்திறனை 14% க்கும் அதிகமாக அடைந்துவிட்டன. சமீபத்திய ஆண்டுகளில், உலோகம்-இல்லாத கரிம உணர்த்திகள் போட்டித்திறன் மாற்றுகளாக உருவாகியிருக்கின்றன, ஏனெனில் அவற்றின் குறைந்த செலவு, கட்டமைப்பு மாற்றுவது எளிது, உயர் மோலார் அழிவு குணகம், உறிஞ்சுதல் அலைநீளம் மற்றும் சுற்றுச்சூழல் நட்புரீதியான பண்புகளை கட்டுப்படுத்துதல்.

இந்த கட்டுரையில், 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலச் சாயம் இரசாயன முறையின் மூலம் தயாரிக்கப்பட்டதையும், ஒளியியல், மின்சக்தி, வெப்ப, ஒளிமின்னழுத்த மற்றும் ஒளிநிலைப்புத்தன்மை பண்புகள் ஆகியவை ஆய்வு செய்யப்பட்டன.

2. சோதனைகள்

2.1. பொருட்கள்

அனைத்து ரசாயனங்களும் சிக்மா-அல்ட்ரிச் நிறுவனத்திடமிருந்து பெறப்பட்டவை, மேலும் கரைப்பான்கள் சுத்திகரிப்பு இல்லாமல்

பயன்படுத்தப் பட்டன.

2.2. பகுப்பாய்வு முறைகள்

தயாரிக்கப்பட்ட சேர்மங்கள் ¹H NMR மற்றும் ¹³C NMR நிறமாலை DMSO-D6 இல் Bruker AV III 500 MHz FT NMR ஸ்பெக்ட்ரோமீட்டரில் பதிவு செய்யப்பட்டது. பல்வேறு கரைசல்களுடன் சாயங்கள் மின்னணு நிறமாலையானது பெர்கின்-எல்மர் லாம்ப்டா -35 UV-Vis NIR நிறமாலை ஒளிமானி மூலம் பதிவு செய்யப்பட்டது. வர்சா STAT3 (AMETEK) மின் வேதியியல் பணி நிலையத்தைப் பயன்படுத்தி சுழற்சி மின்னழுத்த வேலைகள் மேற்கொள்ளப்பட்டது. AG / AgCl குறிப்பு மின்னழுத்தமாக பயன்படுத்தப்பட்டது, ஜி.சி. மின்வலை மற்றும் பிளாட்டினம் போன்ற எதிர்மறை சாதனங்களாக பயன்படுத்தப்பட்டது. சாயத்தின் ஒடுக்க திறன் DMF இல் 0.1 M TBAPF6 உடன் 100 MV s⁻¹ ஸ்கேன் வீதத்துடன் அளவிடப்படுகிறது. சூரிய மின்கல செயல்திறன் ஒரு செனான் விளக்கு மூலம் ஒரியல் வகுப்பு-AAA Simulator (நியூபோர்ட்) பயன்படுத்தி 100 மெகாவாட் / செ.மீ 2 செறிவு கொண்ட ஒரு ஒளி மூலமாக அளவிடப்படுகிறது. சோதனைக்கு முன்னர், ஒளிச்செறிவு ஒரு நிலையான பி.வி. மேற்கோள் செல் (ஒற்றை ஆற்றலியல் சிலிக்கான் சூரிய மின்கலம், NREL, கொலராடோ, யு.எஸ்.ஏ வில் அளவீடு செய்யப்பட்டது) ஒரு கீத்லி 2400 மூலக்கூறுடன் சரிசெய்யப்பட்டது

2.3. சாய-உணர்ச்சிப்பாடுடைய சூரிய மின்கலன்கள் உருவாக்குதல்

அல்ட்ராசோனிக் தொட்டியை பயன்படுத்தி ஐசோபரோபனால், எத்தனோல் மற்றும் நீர் மூலம் ஃப்ளூரின் SnO₂ கண்ணாடியானது (FTO 15Ωcm⁻²) 30 நிமிடங்கள் கழுவப்பட்டது. FTO கண்ணாடியானது 40 நிமிடங்கள் 70°C இல் TiCl₄ நீர்மகரைசலில் மூழ்குமாறு வைக்கப்பட்டது, பின்னர் 30 நிமிடங்கள் காற்றுச் சூழலில் 450°C வெப்பநிலையில் வெப்பப்படுத்தப்பட்டது. TiO₂ நானோ துகள்களானது (Degussa P25 Solaronix) ட்ரைடான் எக்ஸ் -100, அசிடல் அசிட்டோன், எத்தனோல் மற்றும் நீர் ஆகியவை சேர்த்து உரிய நேரத்தில் அரைக்கப்பட்டது. டாக்டர் பிளேடு முறை மூலம் TiO₂ நானோ துகள்கள் 10 μm தடிமன் அளவிற்கு FTO வில் வார்க்கப்பட்டது. TiO₂ மூலக்கூறுகள் காற்று வளிமண்டலத்தில் 30 நிமிடங்கள் காற்றுச் சூழலில் 450°C வெப்ப நிலையில் வெப்பப்படுத்தப்பட்டது. பின்னர் 40

நிமிடங்கள் 70°C இல் $TiCl_4$ நீர்ம கரைசலில் மூழ்கு மாறுவைக்கப்பட்டது, பின்னர் FTO 30 நிமிடங்கள் 450°C வெப்பநிலையில் வெப்பப்படுத்தப்பட்டது. 80°C க்கு குளிர்ச்சியடைந்த பின், TiO_2 நேர்மின் முனையானது 0.5mM சாயக்கரைசலில் அறை வெப்பநிலையில் 24 மணிநேரத்திற்கு வைக்கப்பட்டது. பிறகு எத்தனாலில் கழுவப்பட்டது.

FTO வில் Pt (Platisol Solaronix), எதிர்மின் முனையாக டாக்டர் பிளேடு முறை மூலம் வார்க்கப்பட்டது, பின்னர் FTO ஆனது 30 நிமிடங்களுக்கு 450°C வெப்பநிலையில் வெப்பப்படுத்தப்பட்டது. ஒளிமின்னழுத்த அளவுகள் TiO_2 எலக்ட்ரோடில் மின் உணரும் ஒலிகோயின் டெரிவேடிவ்வைக் கொண்டிருக்கும் மற்றும் PT எதிர் மின்னழுத்தமாக வைத்து ஒரு சாண்ட்விச் போன்று சூரிய மின்கலம் தயாரிக்கப்பட்டது. எலக்ட்ரோலைட்டில் I-/I³⁺ ஐ (Iodolyte Solaronix)

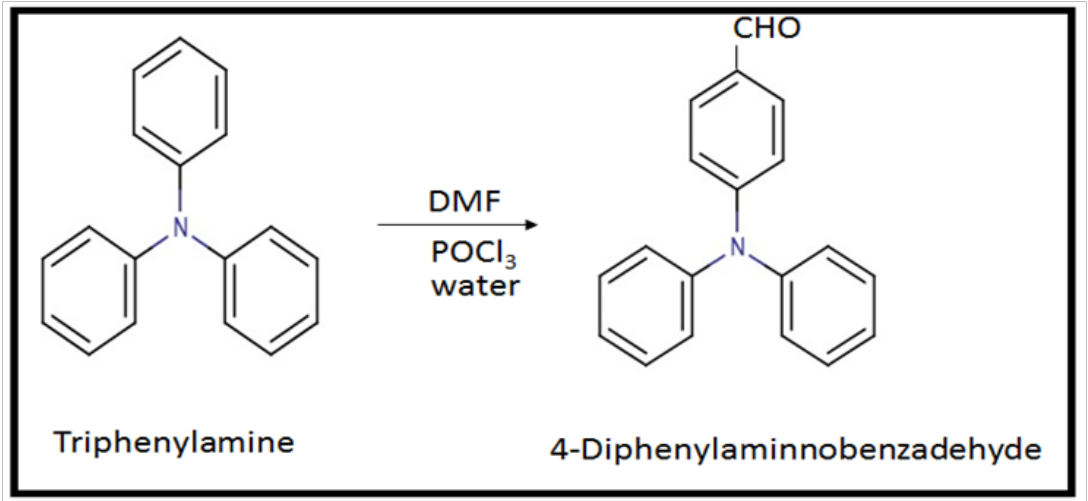
ரெடோக்ஸின் ஆற்றலைக் கொண்டிருக்கிறது மற்றும் செல்கள் திறமையான வேலை செய்யும் பகுதி 0.5 செ.மீ. 0.5 செ.மீ ஆகும். சூரிய ஒளியின் செயல்திறனைப் பெற பின்வரும் சமன்பாட்டில் J-V சுற்றில் இருந்து பெறப்பட்ட திறந்த சுற்று மின்னழுத்தம் (V_{oc}), குறுகிய சுற்று மின்னோட்ட அடர்த்தி (J_{sc}), நிரப்புக் காரணி (FF) போன்ற அனைத்து சூரிய மின்கல பண்புகளும் பயன்படுத்தப்பட்டன.

$$\text{திறன்} = \frac{J_{sc} \text{ (mAcm}^{-2}) \times V_{oc} \text{ (V)} \times FF}{P_{in} \text{ (mW cm}^{-2})}$$

2.4. ஒலிகோயினின் சாயம் தயாரித்தல்

பினைல் தொகுதி-இணைக்கப்பட்ட ஒலிகோயினின் சாயமானது பின்வரும் வழி முறைகளை பயன்படுத்தி தொகுக்கப்பட்டது.

2.4.1. 4-டைபினைல்அமினோபென்சல்டிஹைடு தயாரித்தல்



படம் -1. 4-டைபினைல்அமினோபென்சல்டிஹைடு தயாரித்தல்

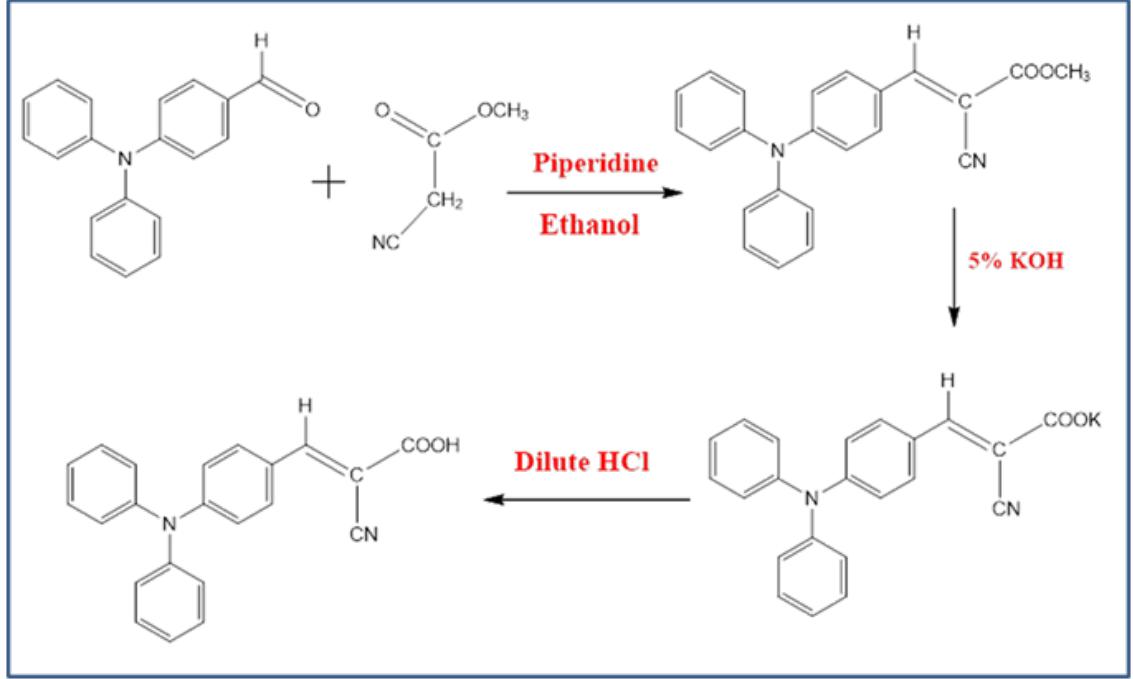
4.4 ml பாஸ்பரஸ் (V) ஆக்சிகுளோரைடு 8.5 ml டைமேத்தில்பார்மமைடு உலர் நிலையில் கிளறிவிட்டு, பின்னர் 5.97 கிராம் ட்ரைபினைல்அமின் சேர்க்கப்பட்டு பின்னர் 24 மணி நேரத்திற்கு 35 டிகிரி செல்சியஸ் வெப்பநிலையில் பராமரிக்கப்படுகிறது. பின்னர்

பனி நீரில் ஊற்றப்பட்டது. நீர் வடிகட்டப்பட்டு கழுவப்பட்டது. கடைசியாக மஞ்சள் தூள் போன்ற பொருள் பெறப்பட்டது, இந்த வேதிவினை படம் 1இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. பின்னர் அது டைகுளோரோமீத்தேன் பயன்படுத்தி குழாய்நிற வண்ணப்பிரிகையின் மூலம்

சுத்தப்படுத்தப்பட்டது. ¹H NMR (CDCl₃, 400MHz) δ (ppm) 9.88 (s H, CHO), 7.7 (d, J = 7.6 Hz, 1H, ArH), 7.3 (d, J = 6.4 Hz, 1H, ArH), 7.2 (s 4H, ArH), 7.18 (s H, ArH), 7.16 (s 3H, ArH), 7.0 (d, J = 6 Hz,

4H, ArH). ¹³C NMR (400MHz, CDCl₃) δ (PPM) 190.4, 148, 146.3, 131.4, 129.6, 126.4, 123.9, 122.4, 119.5. GC-MS: m/z calculated for [C₁₉ H₁₅ N O + H] + 273.3285. Found: 273.3327 [M+H] +.

2.4.2.2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனாய்க் அமிலம் தயாரித்தல்



படம் -2. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனாய்க் அமிலம் தயாரித்தலின் படிப்படியான வேதிவினைகள்

2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனாய்க் அமில சாயம் பின்வரும் செயல்முறையைப் பயன்படுத்தி தயாரிக்கப்பட்டது. 4-டைபினைல் அமினோபென்சால்டினைடு, மெத்தில்சயனோ அசிட்டேட், பிப்பீரிடின் மற்றும் எத்தனால் ஆகியவை 2 மணி நேரம் 80°C யில் வினைபடுத்தப்பட்டது. உருவாகிய வீழ்படிவானது வடிகட்டி பின்னர் எத்தனால் கொண்டு கழுவப்பட்டது. பின்னர் 5% KOH எத்தனால் சேர்க்கப்பட்டு 80°C வெப்பநிலையில் 2 மணி நேரம் வேப்பப்படுத்தப்பட்டது பின்னர் தண்ணீர்கொண்டு நிர்க்கப்படுகிறது. இறுதியாக 10% ஹைட்ரோகுளோரிக் அமிலம் சேர்க்கப்பட்டு, பின்னர் வீழ்படிவு உருவாகியது. உருவாகிய வீழ்படிவானது வடிகட்டி பின்னர்

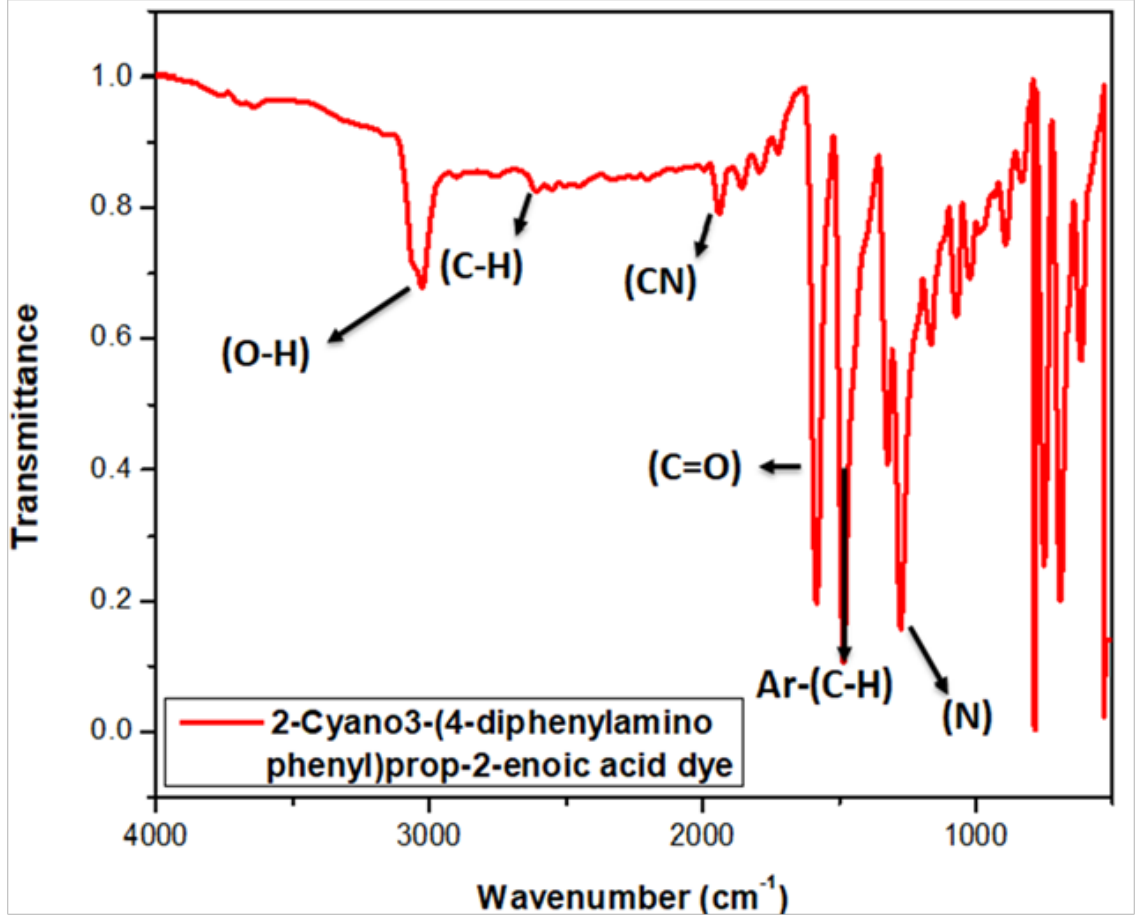
எத்தனால் கொண்டு கழுவப்பட்டதை படம் 2ல் காட்டப்பட்டுள்ளது.

குழாய் நிற வண்ணப்பிரிகையின் மூலம் சுத்தப்படுத்தப்பட்டது எத்தில் அசிட்டேட் மற்றும் பெட்ரோலியம் பென்சீன் ஆகியவற்றின் அளவு 95:5 என்ற விகிதத்தில் எடுக்கப்பட்டது. ¹H NMR (DMSO-D₆, 400MHz) δ (ppm) 9.7 (s H, COOH), 7.6 (d, J = 8.8 Hz, 6H, Aromatic-H), 7.3 (t, J = 8.8 Hz, 2H, Aromatic-H), 7.1 (d, J=7.2 Hz 2H, Aromatic-H), 2.7 (s, H, Me). ¹³C NMR (400MHz, DMSO-D₆) δ (PPM) 190.4, 153.4, 147.9, 146.2, 131.3, 129.7, 126.3, 125.1, 124.2, 122.7, 77.08. GC-MS: m/z calculated for [C₂₂ H₁₆ N₂ O₂ + H] + 340.3746. Found: 340.3752 [M+H] +.

3. .:புரியர் மாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலை

2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் FTIR நிறமாலையானது ATR நுட்பத்தைப் பயன்படுத்தி மேற்கொள்ளப்பட்டது. இது படம்-3 ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. கார்பாக்சிலிக் அமிலக் குழுவில் உள்ள ஹைட்ராக்சைல் (OH-

) பிணைக்கப்பட்டிருக்கும் அதிர்வுகளை 3031 செ.மீ. இல் காணலாம். மீதேன் (C-H) குழுவின் நீட்டிப்பு அதிர்வுகளுக்கு காரணமாக 2624 செ.மீ-இல் உள்ளது, 1941 செ.மீ.-1ல் உள்ள பலவீனமான அலைக்கற்றை Cyano (C≡N) குழுவின் நீட்டிப்பு அதிர்வுகளுக்கு காரணமாக உள்ளது.



படம்-3.2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் ஃபுரியர் மாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலை

கார்பாக்சிலிக் அமிலக் குழுவில் பிணைக்கப்பட்டுள்ள கார்போனல் (C=O) குழுவின் நீட்டிக்கக் கூடிய அதிர்வுகளுக்கு காரணமாக 1590 செ.மீ. க்கு குறுக்கே உள்ள குறுகிய அலைக்கற்றையினால், 1586 செ.மீ-1 சுற்றி அலைக்கற்றை (C=C)

குழுக்களால் உள்ளது, 1438 செ.மீ-1 சுற்றி அலைக்கற்றை (CH) குழுவின் நீட்டிப்பு அதிர்வுகளால் ஏற்படுகிறது. 1321 செ.மீ.-ல் உள்ள அலைக்கற்றை (CH₂) குழுவின் நீட்டிப்பு அதிர்வுகளை பிரதிநிதித்துவப்படுத்துகிறது மற்றும் 776 செ.மீ-1 அலைக்கற்றை அமினோ

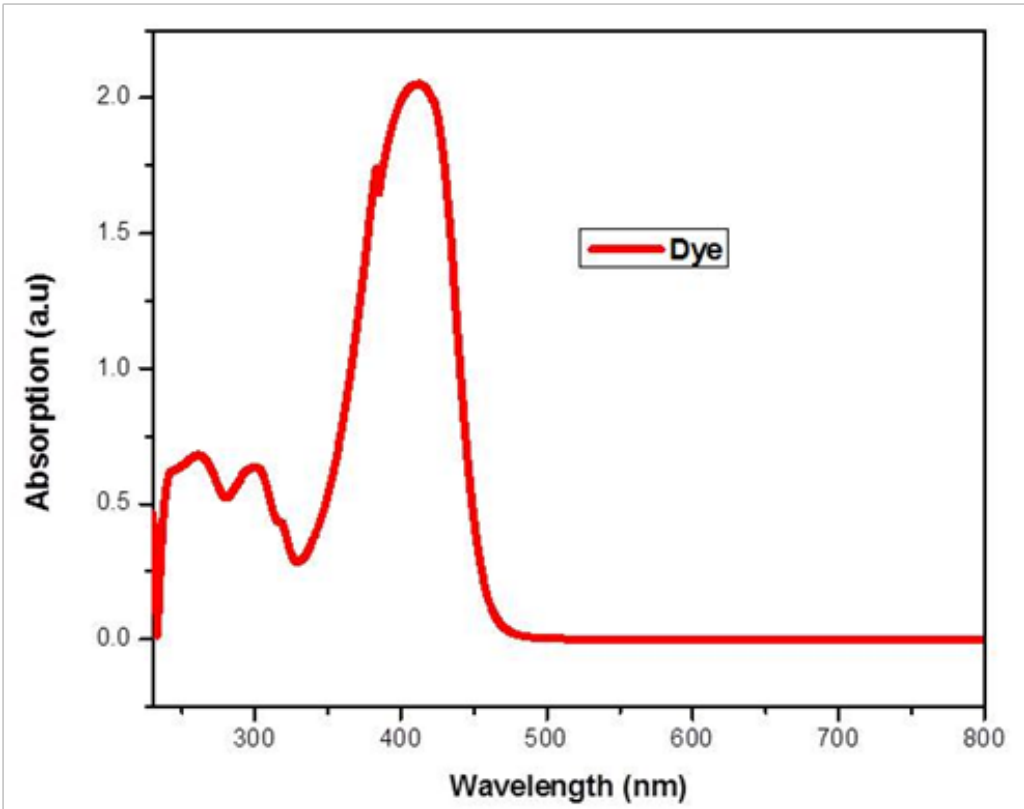
(N) குழுவின் [24-27] நீட்டிப்பு அதிர்வுகளுக்கு காரணமாக இருக்கிறது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில செயல்திறன் தொகுதிகளை FTIR நிறமாலை உறுதிப்படுத்தியது.

4. முடிவுகள் மற்றும் விவாதங்கள்

4.1. புற ஊதா அகச்சிவப்பு கப்புலனாகும்-நிறமாலை

பினைல் தொகுதி-இணைக்கப்பட்ட ஒலிகோயினின் சாயத்தில் அமினோ தொகுதி எலெக்ட்ரான் நன்கொடைக் குழுவாகவும், மீத்தீன் தொகுதி இணைக்கும் குழுவாகவும் சயனோ அக்ரைலிக் அமிலமானது எலெக்ட்ரான் ஏற்கும் குழுவாகவும் உள்ளது, இது டோனர்-பி-ஏற்பு மூலக்கூறு கட்டமைப்புகளைக் கொண்டிருக்கும் மற்றும் இது மிகவும் திறமையான

உணர்திறன் கொண்ட ஒன்றாகும். இந்த சாய மூலக்கூறுகள் பல ஆராய்ச்சியாளர்கள் [28-33] மூலம் ஆய்வு செய்யப்பட்டுள்ளன. மீத்தீன் மற்றும் பினைல் அலகுகளின் நீட்டிப்பு கூட்டிணைப்பு முறையின் விரிவாக்கம் காரணமாக உறிஞ்சுதல் நிறமாலையில் ஒரு நேர்மறையான மாற்றத்தை தூண்டுகிறது. மேலும் அமினோ அலகுகள் அறிமுகம் மேலும் அமினோ மாதிரிகள் எலக்ட்ரான் நன்கொடை காரணமாக உறிஞ்சுதல் ஸ்பெக்ட்ரம் உள்ள நேர்மறையான மாற்றங்கள் தூண்டுகிறது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் உறிஞ்சுதல் நிறமாலை டைமேத்தில் பார்மமைடு கரைப்பானினால் கரைத்து பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது. 200-480nm வரையில் பெறப்பட்ட உறிஞ்சுதல் படம் 4 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது.

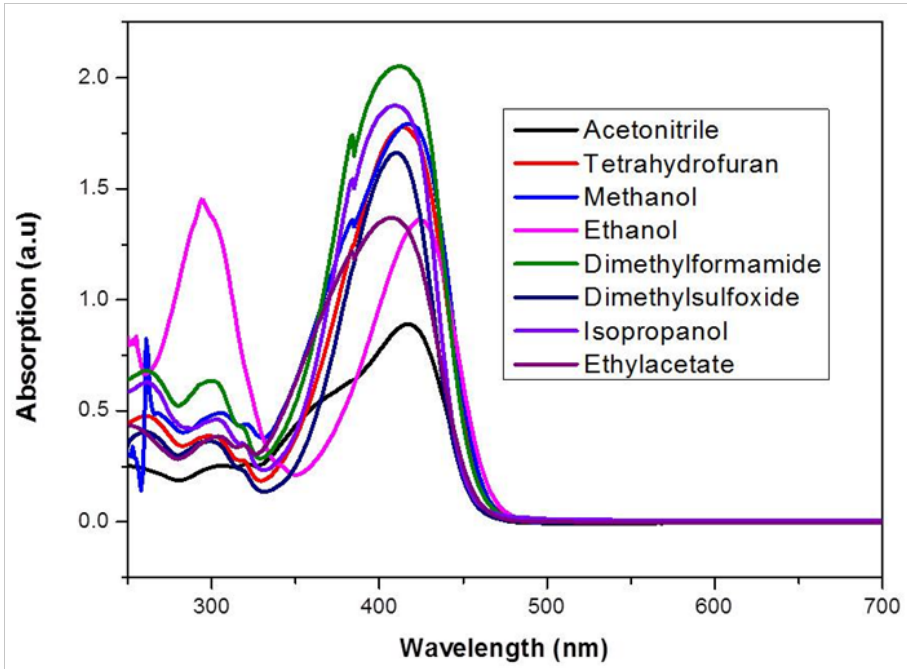


படம் -4. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் புற ஊதா அகச்சிவப்பு கப்புலனாகும்-நிறமாலை

வழங்கும் மற்றும் ஏற்றுக் கொள்ளும் தொகுதிகளின் சார்ஜ் பரிமாற்றத்தின் காரணமாக சாயமேற்றும் புற ஊதா மற்றும் புலப்படும் பகுதியில் பெரும் உறிஞ்சுதல் பட்டைகள் வெளிப்படுகின்றன. அதிகபட்ச உறிஞ்சுதல் (λ_{max}) மதிப்புகள் 261nm, 301 மற்றும் 412nm இல் காணப்படுகின்றன. கூடுதலாக, புற ஊதாப்பகுதியில் (261 மற்றும் 301 nm) முதல் இரண்டு ஒளி பட்டைகள் இணைக்கப்பட்ட மூலக்கூறு $\pi-\pi^*$ மாற்றங்களுக்கான காரணமாகும். 412 nm இல் புலப்படும் பகுதியில் இரண்டாவது வலுவான ஒளிக்கற்றை n இணைந்த $n \rightarrow \pi^*$ மாற்றம் காரணமாக உள்ளது. சாய மூலக்கூறின் கட்டமைப்பிலுள்ள மீத்தேன் அலகு மற்றும் கார்பாக்சில் குழு ஆகியவை ஸ்பெக்ட்ரத்தில் சிவப்பு மாற்றத்தைக் கொண்டுள்ளன, இந்த சிவப்பு மாற்றம் சூரிய ஒளியில் இருந்து ஒளி அறுவடைக்கு ஏற்றது. மோலரின் அழிவு குணகம் $12,80,000 \text{ L M}^{-1} \text{ செ.மீ}^{-1}$ எனக் காணப்படுகிறது, இது சாய மூலக் கூறானது வலுவான ஒளி அறுவடை திறனை வெளிப்படுத்துகிறது என்பதைக் காட்டுகிறது.

அசிட்டோனைற்றில், டெட்ரா ஹைட்ரோஃபுரான், மெத்தனால், எத்தனால், டைமிதில்ஃபார்மைடு, டைமிதில்சல்பாக்சைடு, ஐசொப்ரோப்பனால் மற்றும் எத்தில் அசிட்டேட் போன்ற பல கரைப்பான்களின் கரைசல்களில் 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலசாயத்தின் உருஞ்சுதல் ஸ்பெக்ட்ரம் எடுத்துக்கொள்ளப்பட்டது. 200–480 nm வரையில் உறிஞ்சுதல் ஸ்பெக்ட்ரம் அலைவரிசைகள் பெறப்பட்டன,

மேலும் அது படம் 5 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. அனைத்து கரைசல்களையும் ஒப்பிட்டு, 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலம் உடன் டிமெத்தில்பார்மைமைட் ஒப்பிடுகையில் 412nm இல் உறிஞ்சப்படுகிறது, இது அதிகப்படியான கரைப்பான் துருவமுனை அதிகரிப்பதால் அதிக தீவிரம் கொண்டது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் அதிகபட்ச உறிஞ்சுதல் (λ_{max}) அனைத்து கரைப்பான்களையும் அதன் மோலரின் அழிவு குணகத்தையும் அட்டவணை 1 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் -5. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் புற ஊதா அகச்சிவப்பு கட்டிலானாகும்-நிறமாலை வெவ்வேறு கரைப்பான்களுடன்.

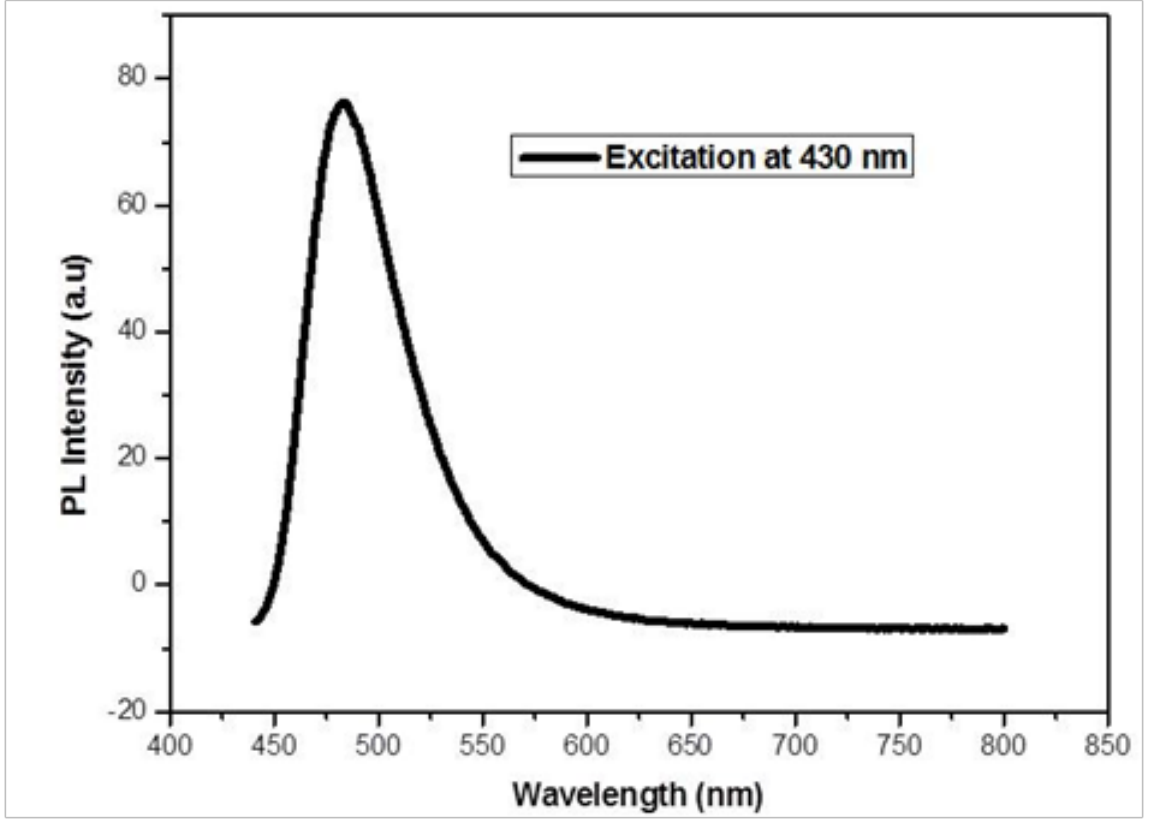
கரைப்பன்கள்	மோலார் அழிவு குணகம் $\lambda_{\max}(\text{nm})(\epsilon_{\max} \times 10^5 (\text{L mol}^{-1} \text{cm}^{-1}))$
Acetonitrile	302.57 (0.24), 417.07 (0.71)
Tetrahydrofuran	262.55 (0.38), 300.14 (0.31), 417.4 (1.40)
Methanol	308.22 (0.4), 417.94 (1.43)
Ethanol	294.59 (1.15), 425.15 (1.08)
Dimethylformamide	262.55 (0.53), 302.5 (0.50), 413.07 (1.64)
Dimethylsulfoxide	260.12 (0.31), 301.01 (0.28), 410.7 (1.32)
Isopropanol	261.78 (0.49), 304.22 (0.36), 409.86 (1.49)
Ethyl acetate	304.22 (0.31), 409.86 (1.08)

அட்டவணை-1. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் புற ஊதா அகச்சிவப்பு கட்புலனாகும்- மதிப்பு மற்றும் வெவ்வேறு கரைப்பன்களுடனான மோலார் அழிவு குணகம்

4.2. ஒளி உமிழ்தல் நிறமாலை

2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலம் 10^{-4} மோல் L^{-1} இன் ஒளி உமிழ்தல் நிறமாலை டைமிதில்ஃபார்மைடு பயன்படுத்தி தூண்டுதல் அலைநீளம் 430nm இல் எடுக்கப்பட்டது. ஒளி உமிழ்தல் நிறமாலை 450-570nm வரையில் காட்சிப்படுத்துகிறது இது படம் 6ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. நீண்ட அலைநீள உமிழ்தல் மற்றும் குறுகிய அலைநீள உமிழ்வுகளின்

தொடர்புடைய தீவிரத்தன்மை சாயத்துடன் கூடிய கரைப்பான் முனைவுறுத்தும் தன்மையைச் சார்ந்துள்ளது. அதிகபட்ச உமிழ்வு (λ_{em}) 480nm இல் காணப்படுகிறது. அதிகபட்ச உமிழ்வு அதிக முனைவுக் கரைப்பான்களில் நீண்ட அலைநீளத்திற்கு மாற்றப்பட்டு, நேர்மறை ஒளிர் திறக்கத்தை வெளிப்படுத்துகிறது, இது மூலக்கூறுகள் அடிமட்ட அற்றல் மட்டத்தைவிட மேல்மட்ட அற்றல் மட்டங்களில் மிகவும் அதிக முனைவுறுத்தும் தன்மை இருப்பதைக் குறிக்கிறது.

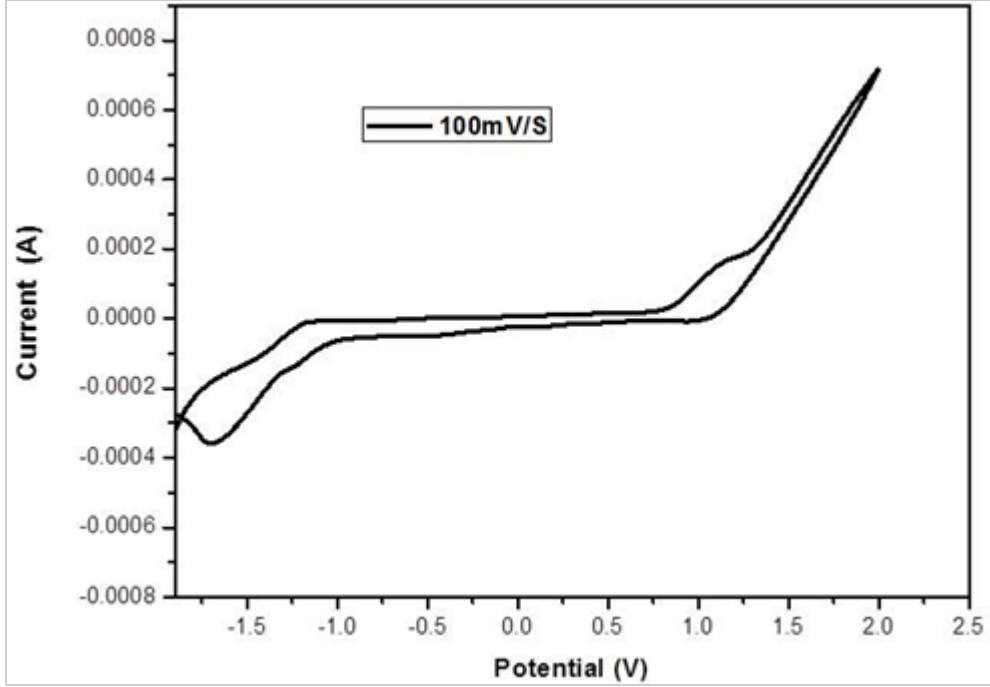


படம் -6. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் ஒளி உமிழ்தல் நிறமாலை

4.3. சுழற்சி மின்னழுத்த அளவியல் பகுப்பாய்வு

எலக்ட்ரோகெமிக்கல் நடத்தை மூன்று மின்வழி முறையில் கண்டுபிடிக்கப்படுகிறது. இதில் சாயமானது டைமிதில்ஃபார்மைடு 1.0 mM ($M = \text{mol.dm}^{-3}$) கரைப்பனையும் மற்றும் 0.1M டேட்ராபியுட்டைல் அம்மோனியம் எக்ஸாபுளோரோபாஸ்பேட் (TBAPF6) என்ற சார்பு ஏலக்ட்ரோலைட் ஆகியவற்றைக் கொண்டிருக்கும். ஒடுக்க மற்றும் ஆக்சிஜனேற்ற

சிகரங்கள் தெளிவுபடுத்தப்பட்டுள்ளன. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் சுயற்சி மின்னழுத்தமானி அளவிடு 20 டிகிரி செல்சியஸ் வெப்பநிலையில் 100 மெ.வி.-1 மற்றும் ஸ்கேனிங் விகிதத்தில் Ag/AgCl மேற்கோள் எலக்ட்ரோடு ஆகவும், glassy கார்பன் வேலைசெய்யும் எலக்ட்ரோடு ஆகவும் மற்றும் பிளாட்டினம் எதிர்மின்முனை ஆகவும் பயன்படுத்தி எடுக்கப்பட்டது.



படம் -7. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் சுழற்சி மின்னழுத்த அளவியல்

மின்னாற்பகுப்பு போன்ற மின்சக்தி கரிம கார்பன் சேர்மங்களின் குணாதிசயங்களை மதிப்பிடுவதற்கும், ஒளிக்கற்றை வரைபடத்திலிருந்து ஆற்றல் ஒளிக்கற்றை மதிப்பீடுகளை மதிப்பிடுவதற்கும் மிகவும் பயனுள்ள உத்திகளில் சுயற்சி மின்னழுத்தமானி அளவிடு முக்கியமான ஒன்றாகும். கரிம பொருட்களின் HOMO என்பது ஒரு மூலக்கூறிலிருந்து ஒரு எலக்ட்ரானைப் பிரித்தெடுக்க தேவையான ஆற்றலைக் குறிக்கிறது. இது ஒரு ஆக்சிடேசன் செயல்முறை மற்றும் LUMO ஒரு எலக்ட்ரான் ஒரு மூலக்கூறிற்கு உட்செலுத்துவதற்கு அவசியமான ஆற்றல் ஆகும், இதனால் ஒரு குறைப்பு செயல்முறை [34]. அதிகபட்சம் நிரப்பப்பட்ட மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் (HOMO) மதிப்பானது சுழற்சி மின்னழுத்த அளவியலின் தரவு அயனியாக்கம் செய்வதற்கு சாத்தியமான அளவீடு மூலம் நேரடியாக நிர்ணயிக்கப்படுகிறது மற்றும் குறைந்தபட்சம் நிரப்பப்படாத மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் (LUMO) மதிப்பானது உறிஞ்சுதல் ஸ்பெக்ட்ரலிலிருந்து

கண்டறியப்படுகிறது.

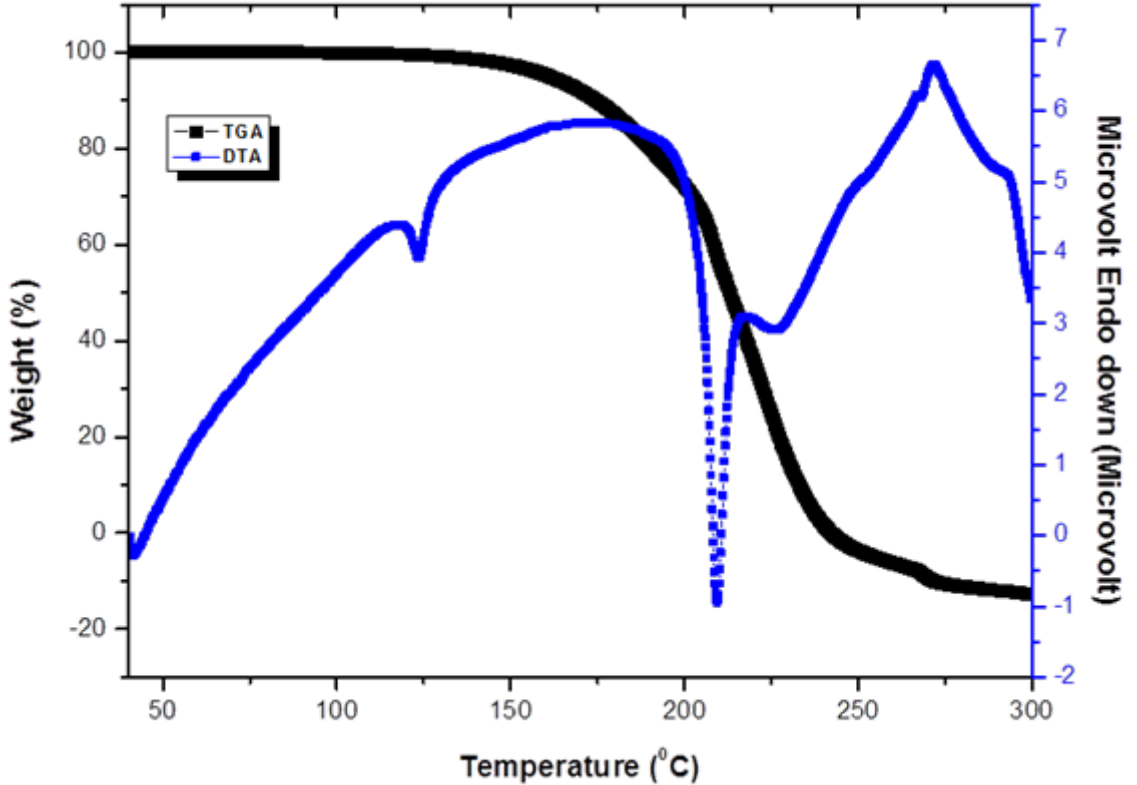
2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயமானது ஒரு ஆக்சிடேசன் ஒளிக்கற்றையையும் ஒரு ஒடுக்க ஒளிக்கற்றையையும் கொண்டுள்ளது இதுபடம் 7 ல் காண்பிக்கப்படுகிறது. இதற்கு ஆக்சிடேசன் மற்றும் ஒடுக்க செயல்முறைகளில் ஈடுபடும் ஒரு எலக்ட்ரான் காரணமாக உள்ளது. சாய மூலக்கூறின் E_{Ox} (துவக்கம்) மதிப்பு 1.16 V மற்றும் சாய மூலக்கூறின் E_{red} (துவக்கம்) மதிப்பு -1.69 V ஆகும். HOMO மற்றும் LUMO மதிப்புகள் முறையே 5.81 eV மற்றும் 2.54 eV ஆகும். DSSC இல் HOMO மதிப்பு சாத்தியமான மதிப்பு (-4.94 eV) விட குறைவாக இருக்க வேண்டும், மேலும் LUMO மதிப்பு டைட்டானியம் டை ஆக்சைடு (-4.04 eV) கடத்துகை மதிப்புக்கு அதிகமாக இருக்க வேண்டும். எனவே, தற்போதைய சாயம் DSSC பயன்பாட்டிற்கு மிகவும் ஏற்றது என்று முடிவு செய்யலாம். 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப்

2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் HOMO, LUMO மற்றும் ஆற்றல் இடைவெளி மதிப்புகள் 5.81 eV, -2.54 eV மற்றும் 3.27 eV ஆகியவை ஆகும்.

4.4. வெப்ப பகுப்பாய்வு

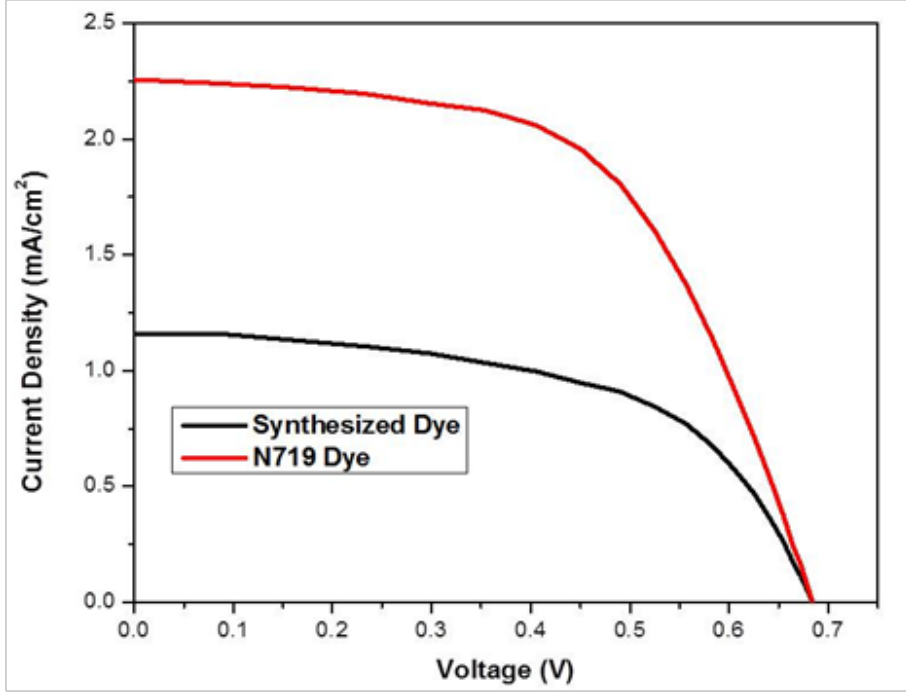
டிராகன்-எல்மர் டயமண்ட் TG-DTA வெப்ப பகுப்பாய்வைப் பயன்படுத்தி வழக்கமான சூழலில் 35°C முதல் 300°C வரை ஒருங்கிணைக்கப்பட்ட 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் ($C_{22}H_{16}N_2O_2$) வகைப்பாட்டு பண்பறி பகுப்பாய்வு மற்றும் வகைப்பாட்டு வெப்ப பகுப்பாய்வு மூலம் சாயத்தின் உருகு நிலை மற்றும் சிதைவு நிலை கண்டறியப்பட்டது (TG-DTA) இது படம் 8இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாய மாதிரி (2 mg) தூள்

பயன்படுத்தப்பட்டது. சாயங்கள் 124 டிகிரி செல்சியஸ் வெப்பநிலையில் உருகுகின்றன. 173 டிகிரி செல்சியஸ் இல் எடை இழப்பும் (TGA) மற்றும் அதனுடன் தொடர்புடைய சிதைவு புள்ளி (DTA) 209 டிகிரி செல்சியஸ் என கண்டறியப்படுகிறது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் சிதைவு பொருட்கள், கார்பன் மோனாக்சைடு, நைட்ரஜன், பென்சீன் மற்றும் மீத்தீன் ஆகியவை இருக்கலாம். 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தில் ஒரு கார்பன் மோனாக்சைடு (CO), பென்ஸினின் மூன்று மூலக்கூறுகள் (C_6H_6), நைட்ரஜன் (N_2) இரண்டு மூலக்கூறுகள் மற்றும் 230 டிகிரி செல்சியஸ் வெப்பநிலை (CH = CH) ஆகியவற்றின் மூலக்கூறுகளை வெளியேற்றுகிறது.



படம் -8. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் வெப்ப பகுப்பாய்வு

4.5. சூரிய மின்கலத்திறன்



படம் -9. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலம் மற்றும் N719 சாயங்களின் சூரிய மின்கலத்திறன்

தயாரிக்கப்பட்ட 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் சூரிய மின்கல செயல்திறன் பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது. வணிக ரீதியாக கிடைக்கக்கூடிய N719 சாயம், தயாரிக்கப்பட்ட சாயம், I/I³⁻ (Iodolyte Solaronix) அடிப்படையிலான எலக்ட்ரோலைட் மற்றும் பிளாட்டினம் (Platisol S Solaronix) TiO₂ (Degussa P25 Solaronix) 10µm தடிமண் ஆகியவற்றைக் கொண்டு தரமான காற்றழுத்தத்தின் கீழ் 1.5 உலகளாவிய ஸ்பெக்ட்ரம் சூரிய ஒளியின் பாய்வு மூலம் பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது இது படம் 9இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில அடிப்படையிலான DSSC சாதனத்தின் ஒட்டுமொத்த சக்தி மாற்றம் செயல்திறன் (PCE) என்பது அட்டவணையில் காட்டப்பட்ட 1.76% ஆகும் இது அட்டவணை-2 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. இது தரநிலை I/I³⁻ அடிப்படையிலான ஆக்சிஜனேற்றஒடுக்க

எலக்ட்ரோலைட்டோடு இணைந்து 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில உணர்திறன் சாதனத்தின் எலக்ட்ரான்-தூண்டப்பட்டு ஒன்று சேர்ந்துயிருப்பதைக் குறிக்கிறது. இந்த முடிவுகளிலிருந்து DSSC க்கள் 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் உடன் உணர்திறன் கொண்ட எலக்ட்ரான் நன்கொடை டைபினைல் அமினோ இணைந்த தொகுதி சிறந்த சூரியமின்கல செயல்திறன்கொண்ட தொகுதி என்பதை அறியலாம்.

இது டைபினைல் அமினோ இணைந்த தொகுதி அதிகப்படியான இணைந்த இரட்டைப் பிணைப்புகளுக்கு எலக்ட்ரான்களின் செயல்திறன், மீளூருவாக்கம் மற்றும் 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோ பினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில மூலக்கூறுகளிலிருந்து TiO₂ க்கு எலக்ட்ரான் கொடுக்கும் தன்மை அதிகரிப்பதை சாத்தியமாக்குகிறது.

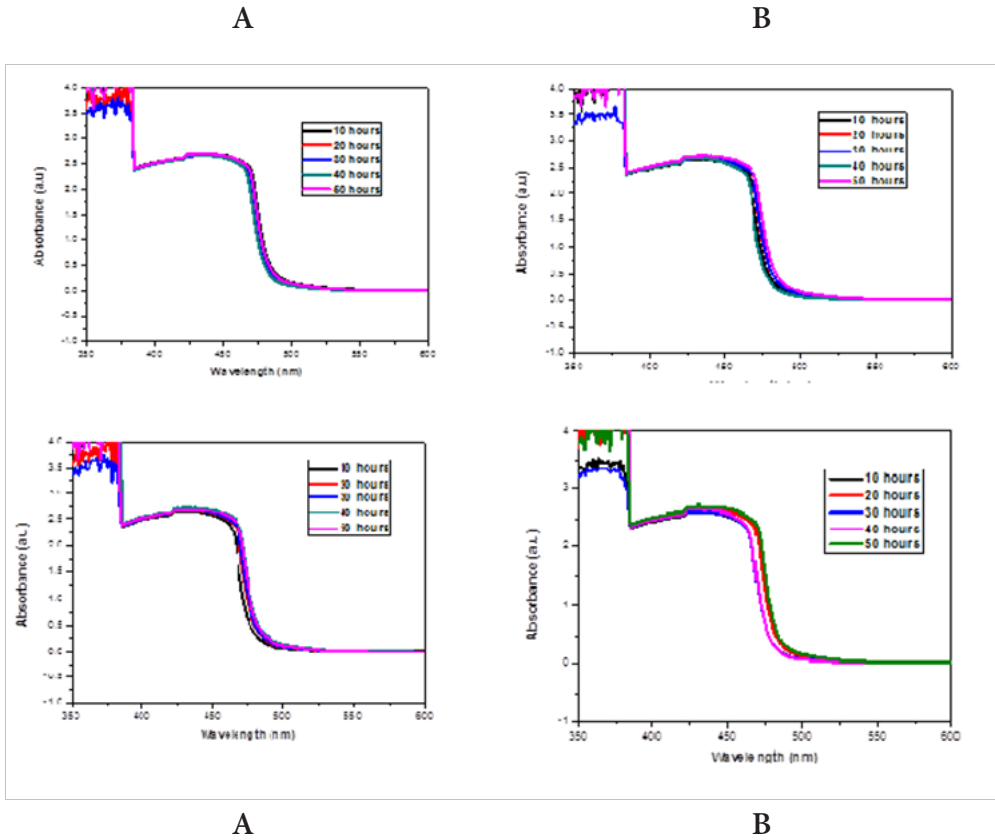
S.No.	Dyes	J_{sc} (mA/cm ²)	V_{oc} (V)	FF	Efficiency
1	Synthesized Dye	4.6	0.67	0.56	1.76 %
2	N719	9.0	0.67	0.57	3.44 %

அட்டவணை-2. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலம் மற்றும் N719 சாயங்களின் சூரிய மின்கலத்திறன் மதிப்பு

4.6. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் நிலைத்தன்மை

2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயத்தின் நிலைத்தன்மை பல்வேறு ஒளி (வெள்ளை ஒளி, ஹேலஜன் ஒளி, புறவூதா ஒளி மற்றும்

சூரிய ஒளி) சாய மூலக்கூற்றின் மீது கதிர்வீச்சு பாயச்சுவதன் மூலம் பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது. ஒரு கிராம் சாயம் ஒவ்வொன்றும் ஒவ்வொரு பெட்ரி டிஷ்லிலும் எடுத்துக் கொள்ளப்பட்டது. விளக்குகள் (வெள்ளை ஒளி, ஹேலஜன் ஒளி, புறவூதா ஒளி மற்றும் சூரிய ஒளி) சாயப்பொருட்களில் தொடர்ந்து கதிர்வீச்சு செய்யப்பட்டன.



படம்-10. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல் அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமிலத்தின் நிலைப்புத்தன்மை

10, 20, 30, 40 மற்றும் 50 மணிநேரங்களுக்கு பிறகு சாய மூலக்கூறுகளின் புறஊதா கண்ணுறு உறிஞ்சுதல் நிறமாலை பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது மற்றும் நிறமாலை படம் 10 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. சூரிய ஒளி கதிர் ஈர மூலக்கூறுகள் உறிஞ்சுதல் ஸ்பெக்ட்ரம் சிறிது குறைந்தது. நேரடி சூரிய ஒளி சாய மூலக்கூறு OH குழுவால் பாதிக்கப்படுகிறது, எனவே உறிஞ்சுதல் பகுதி சற்றே குறைந்துவிட்டது. மீதமுள்ள ஒளி (வெள்ளை ஒளி, ஹேலஜன் ஒளி மற்றும் புற ஊதா ஒளி) கதிர் உறிஞ்சுதல் நிறமாலை மிகவும் ஒத்திருக்கிறது. எனவே தற்போது 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாய கலவை மிகவும் நல்ல ஒளிக்கதிர் தன்மை கொண்டது மற்றும் சாய கலன் நிலையான சாய உணர்திறன் சூரிய செல்கள் (DSSC) பயன்பாடுகளுக்கு ஏற்றது.

5. முடிவு

நன்கொடை-ஈ- ஏற்பு அடிப்படையிலான 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயமானது சிறந்த முறையில் தயாரிக்கப்பட்டது. சிறந்த உறிஞ்சுதல் பண்புகளை கொண்டுள்ளது. சாய மூலக்கூறை அதிகபட்ச உறிஞ்சுதல் மதிப்பை பயன்படுத்தி மோலார் அழிவு குணகம் கணக்கிடப்பட்டது. சுயற்சி மின்னழுத்தமானி பகுப்பாய்வு சாய மூலக்கூறின் HOMO-LUMO மதிப்புகளை வெளிப்படுத்துகிறது, வெப்ப பகுப்பாய்விலிருந்து இது 124°C வரை

சாய மூலக்கூறுகளின் கட்டமைப்பில் எந்த மாற்றமும் இல்லை என்று முடிவு செய்ய முடியும், எனவே இது DSSC பயன்பாடுகளுக்கு மிகவும் ஏற்றது. சாய மூலக்கூறின் ஒளி நிலைப்புத்தன்மையானது பல்வேறு விளக்குகள் பயன்படுத்தி உறுதிசெய்யப்பட்டது மேலும் சாயத்தின் சூரிய செயல்திறன் உலகளாவிய 1.5 சூரிய சூழலின் கீழ் அளவிடப்பட்டது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில உணர்திறன் மின்தேக்கி J_{sc} 4.6 mA செ.மீ², 0.67 V இன் V_{oc} , மற்றும் 0.56 FF, 1.76% ஒட்டுமொத்த சக்தி மாற்றும் திறன் ஆகியவற்றை அளித்தது 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில அடிப்படையிலான சூரிய மின்கலம் டைபினைல்அமின் இன் அதிக வழங்கும் திறன் கொண்டது. 2-சயனோ 3-(4-டைபினைல்அமினோபினைல்) புரொப் 2-ஈனோய்க் அமில சாயங்களின் ஆற்றல் அதிகரிக்கும் திறனை மேம்படுத்துவது என்பது குழுவாக இரட்டை பிணைப்புகளை அதிகரிப்பதன் மூலம் சரிசெய்ய முடியும்.

ஒப்புமை

நிரை பகுப்பாய்வு செய்வதற்காக விஐடி, வேலூர், பல்கலைக் கழகத்திற்கும், ஐ.ஐ.டி. சென்னைக்கும் நன்றி தெரிவிக்கிறார்கள். மேலும் (SERI) DST / TM / SERI / 2k12 / 40 & 04.06.2014 நிதி ஆதாரத்திற்காக நன்றி தெரிவிக்கிறார்கள்.

Reference

1. Y. Wang, L. Wang and, and D. H. Waldeck, *J. Phys. Chem.C*, (2011) 18136-18141.
2. Michael Gratzel, *Acc. Chem. Res*, 42 (2009) 1788-1798.
3. Gratzel, M. et al. *J. Photochem. Photobiol. A* 164, (2004) 3-14.
4. Shah, A., Torres, P., Tscharnner, R., Wyrsh, N. & Keppner, *Science* 285, (1999) 692-698.
5. Gratzel. M. et. Al. *J. Photochem. Photobiol. C* 4, (2003) 145-153.
6. Huizhi Zhou, Liqiong Wu, Yurong Gao, Tingli Ma, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. 219 (2011) 188-194.
7. Nazeeruddin, M. K. et al. *J. Am. Chem. Soc.* 115, (1993) 6382-6390.
8. Gao, F. et al. *J. Am. Chem. Soc.* 130, (2008) 10720-10728.
9. Damien Joly. et al. *Nature. Sci. Reports.* 4, (2014) 4033.
10. Katoh, R. et al. *Energy Environ. Sci.* 2, (2009) 542-546.
11. Wang, Z.-S. et al. *J. Phys. Chem. C.* 112, (2008) 17011-17017.
12. A. Hagfeldt, G. Boschloo, L. Sun, L. Kloo and H. Pettersson, *Chem. Rev.*, 110, (2010) 6595.
13. M. Urbani, M. Gratzel, M. K. Nazeeruddin and T. Torres, *Chem. Rev.*, 114, (2014) 12330.
14. M. K. Nazeeruddin, A. Kay, I. Rodicio, R. Humphry-Baker, E. Muller, P. Liska, N. Vlachopoulos and M. Gratzel, *J. Am. Chem. Soc.*, 115, (1993) 6382.
15. M. K. Nazeeruddin, P. Pechy, T. Renouard, S. M. Zakeeruddin, R. Humphry-Baker, P. Comte, P. Liska, L. Cevey, E. Costa, V. Shklover, L. Spiccia, G. B. Deacon, C. A. Bigozzi and M. Gratzel, *J. Am. Chem. Soc.*, 123, (2001) 1613.
16. A. Yella, H.-W. Lee, H. N. Tsao, C. Yi, A. K. Chandiran, M. K. Nazeeruddin, E. W.-G. Diao, C.-Y. Yeh, S. M. Zakeeruddin and M. Gratzel, *Science*, 334, (2011) 629.
17. S. Mathew, A. Yella, P. Gao, R. Humphry-Baker, B. F. E. Curchod, N. Ashari-Astani, I. Tavernelli, U. Rothlisberger, M. K. Nazeeruddin and M. Gratzel, *Nat. Chem.*, 6, (2014) 242.
18. A.C. Nwanya, P.E. Ugwuoke, P.M. Ejikeme, O.U. Oparaku, and F.I. Ezema *Int. J. Electrochem. Sci.*, 7, (2012) 11219-11235.
19. K.F. Moustafa, M. Rekaby, E.T. El Shenawy, and N.M. Khattab, *Journal of Applied Sciences Research*, 8, (2012) 4393-4404.
20. K.A. Aduloju and F. Ezema, *Archives of Physics Research*, 2, (2011) 191-196.
21. J.O. Ozuomba, A.J. Ekpunobi, and P.I. Ekwo, *International Science Research Journal*, (2011) 3-5.

22. N. Li, N. Pan, D. Li, and S. Lin, International Journal of Photoenergy, 2013, (2013) 1- 5.
23. L.U. Okoli, J.O. Ozuomba, and A.J. Ekpunobi, Research Journal of Physical Sciences, 1, (2013) 6-10.
24. J. Moser, M. Gratzel J. Am. Chem. Soc. 106 (1984) 6557-6564.
25. C. Nasr, D. Liu, S. Hotchandani, P.V. Kamat J. Phys. Chem. 100 (1996) 11054-11061.
26. A.C. Khazraji, S. Hotchandani, S. Das, P.V. Kamat J. Phys. Chem. B 103 (1999) 4693- 4700.
27. Kohjiro Hara, Tadatake Sato, Ryuzi Katoh, Akihiro Furube, Yasuyo Ohga, Akira Shinpo, Sadaharu Suga, Kazuhiro Sayama, Hideki Sugihara, and Hironori Arakawa. J. Phys. Chem. B 107, (2003) 597-606.
28. Nazeeruddin, Md. K.; Zakeeruddin, S. M.; Humphry-Baker, R.; Jirousek, M.; Liska, P.; Vlachopoulos, N.; Shklover, V.; Fischer, C.-H.; Gra"tzel, M. Inorg. Chem. 38, (1999) 6298-6305.
29. Argazzi, R.; Bignozzi, C. A.; Heimer, T. A.; Castellano, F. N.; Meyer, G. J. Inorg. Chem. 33, (1994) 5741-5749.
30. Sugihara, H.; Singh, L. P.; Sayama, K.; Arakawa, H.; Nazeeruddin, Md. K.; Gra"tzel, M. Chem. Lett. (1998) 1005-1006.
31. Yanagida, M.; Singh, L. P.; Sayama, K.; Hara, K.; Katoh, R.; Islam, A.; Sugihara, H.; Arakawa, H.; Nazeeruddin, Md. K.; Gra"tzel, M. J. Chem. Soc., Dalton Trans. (2000) 2817- 2822.
32. Ramakrishna, G.; Ghosh, H. N. J. Phys. Chem. A 106, (2002) 2545- 2553.
33. Kohjiro Hara. et al. J. Phys. Chem. B, 107, (2003) 2.
34. S. Kotteswaran, M. Senthil Pandian and P. Ramasamy Material Research Innovations, 20 (2016) 112-116.

பகுதி கரிம மையசீரான நேர்ச்சார்பிலா 4-டை மெதிலின் அமைன் பிரிடின் பொட்டாசியம் குளோரைடு படிகத்தின் செயல்முறை வளர்ப்பு மற்றும் பண்பறிதல்

ஜே. ஜான்சன், ஆர். சீனிவாசன், டி. சிவாவிஷ்ணு
இயற்பியல் ஆராய்ச்சி துறை, அரசு கலை கல்லூரி, திருவண்ணாமலை

பகுதி கரிம மையசீரான நேர்ச்சார்பிலா 4-டை மெதிலின் அமைன் பிரிடின் பொட்டாசியம் குளோரைடு படிகமானது மெதுவாக ஆவியாதல் முறை மூலம் வளர்க்கப்பட்டது. துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு மூலம் படிக தன்மை ஆராயப்பட்டது. தனி படிக X- கதிர் விளிம்பு விளைவு மூலம் படிகமானது கனசதுர அமைப்பு மற்றும் அலகு கூறு $a = 3.09 \text{ \AA}$, $b = 3.09 \text{ \AA}$, $c = 3.09 \text{ \AA}$ மதிப்புகள் கண்டறியப்பட்டது. படிகத்தின் அதிர்வுறு அதிர்வெண்ணானது ஃபூரியர் அகச்சிவப்பு நிலைமாற்று நிறமாலைமானி மூலம் கணக்கிடப்பட்டது. புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை மூலம் கீழ் வெட்டு அலைநீளம் 261 நா.மீ எனவும் ஒளி பட்டை இடைவெளி 5.52 eV எனவும் கணக்கிடப்பட்டது. ஒளி செலுத்தும் நிறமாலை மூலம் படிகமானது நல்ல உட்பகுதிறன் பண்பை பெற்றுள்ளது என அறிய முடிகிறது. வளர்க்கப்பட்ட படிகத்திற்கு வெப்ப பரும அளவியல் மற்றும் வெப்ப பருமனறி பகுப்பாய்வு ஆய்வுகள் மேற்கொள்ளப்பட்டது. மின்காப்பு மாறிலி ஆய்வின் மூலம் படிகத்தின் மின்காப்பு மாறிலி மற்றும் மின்காப்பு இழப்பு பண்புகள் ஆராயப்பட்டது. நுண்கடின தன்மை ஆய்வின் மூலம் படிகத்தின் கடினத்தன்மை பரிசோதனை செய்யப்பட்டது. வேதியல் அரித்தல் முறை மூலம் வளர்க்கப்பட்ட படிகத்தின் மேற்பரப்பு ஆய்வு செய்யப்பட்டு படிகத்தின் வளர்ச்சி ஆராயப்பட்டது. படிகமானது ஈரிசைவியக்க ஆய்வுக்கு உட்படுத்தப்பட்டது. ஆய்வு முடிவானது வளர்க்கப்பட்ட படிகமானது KDP படிகத்தை ஒப்பிடுகையில் 0.69 மடங்கு அதிகமான ஈரிசைவியக்க மதிப்பை பெற்றுள்ளது.

1. அறிமுகம்

தொலைதொடர்பு துறை, ஒளித்துகளியல், ஒளி தரவு சேமிப்பு, ஒளி மின்னணு கருவிகள் மற்றும் அதிர்வெண் மாற்றிகள் போன்ற பயன்பாடுகளுக்காக புதிய நல்ல நேர்ச்சார்பிலா ஒளியியல் பொருட்கள் உருவாக்கமானது புதிய முயற்சியை ஏற்படுத்தியுள்ளது[1-4]. ஆய்வாளர்களிடையே நேர்ச்சார்பிலா ஒளியியல் பொருட்கள் உருவாக்கத்தால் அதன் புரிதலும்

அதிகரித்துள்ளது[5]. திட நிலை பொருட்களை உருவாக்கும் ஆய்வாளர்கள் அதிக நேர்ச்சார்பிலா ஒளியியல் மற்றும் அதிக நிலைப்புத்தன்மை கொண்ட பொருட்களை உருவாக்குவதில் அதிக முனைப்புடன் உள்ளனர்[6]. இடப்பிசகல் அடர்த்தியுடன் அதிக மின்னூட்ட மாற்றம் பெற்ற பொருட்களானது ஒளி ஊடுறுவுதல் பயன்பாடுகளுக்கு பயன்படுகிறது மற்றும் நேர்ச்சார்பிலா ஒளியியல் பயன்பாடுகளுக்கு புதிய

கரிம , பகுதி கரிம மற்றும் கரிமமற்ற பொருட்கள் கண்டறியப்படுகிறது[7-8].

கரிம படிக்க பொருட்களானது அதிக நேர்ச்சர்பிலா ஒளியியல் பண்பை பெற்றுள்ளதால் அவற்றை சாதன பயன்பாடுகளுக்கு உருவாக்க பயன்படுகிறது. அதிக கரிம படிக்கங்களானது குறைந்த கடினத்தன்மை மற்றும் குறைந்த வெப்ப நிலைப்புத்தன்மை பெற்றுள்ளதால் தொழிற்சாலை பயன்பாடுகளுக்கு பயன்படுத்த முடியாத நிலை உள்ளது. இந்த இடர்பாட்டை நீக்க புதிய கலப்பின கரிம-கரிமமற்ற (பகுதி கரிம) படிக்கங்கள் 1991 உருவாக்கப்பட்டன[9]. பகுதி கரிம படிக்கங்கள் π இணைப்பு பெற்றுள்ளது[10]. அதிக நேர்ச்சர்பிலா ஒளியியல் தன்மை, அதிக லேசர் ஊறுபாடு வாயில், அதிக கடினத்தன்மை, புறஊதா-கட்புல பகுதியில் அதிக ஒளி ஊடுறுவுதல் மற்றும் வெப்ப நிலைப்புத்தன்மை இது போன்ற காரணங்களால் பகுதி கரிம படிக்கங்கள் மீதான ஆராய்ச்சியானது வளர்ச்சி அடைந்துள்ளது[11-17].

பிரிடின் கலவையானது நேர்ச்சர்பிலா ஒளியியல் பயன்பாடுகளுக்கு வெகுகாலமாக பயன்படுத்தப்படுகிறது. பிரிடின் மற்றும் பிரிடின் சார்ந்த பொருட்களானது தொழிநுட்பத்தில் மிகப்பெரிய பங்கு வகிக்கிறது[18]. அதிக உயர் முனைப்பாடு பிரிடினியம் எதிர் அயனியானது கரிமமற்ற நேர்அயனியுடன் சேரும்போது அதிக நேர்ச்சர்பிலா ஒளியியல் பகுதி கரிம பெறப்படுகிறது. 4-டைமெத்தில் அமினோ பிரிடின் அதிக மின்னேற்றம் மாற்றி என கண்டறியப்பட்டது மற்றும் 40 வகையான படிக்க அமைப்பு கண்டறியப்பட்டன[20-24]. பிரிடின் கலவை படிக்கங்கள் அதிக நேர்ச்சர்பிலா ஒளியியல் பண்பு பெற்றுள்ளது என்பதை ஏற்கெனவே உறுதி செய்துள்ளனர்.

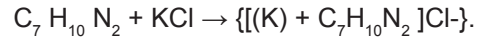
ஈரிசைவியக்க பண்பானது மைய சமச்சீர்மையற்ற படிக்க அமைப்பை சார்ந்துள்ளது என்பதை ஆய்வு மூலம் உறுதி செய்யப்பட்டுள்ளது. மேலும் சில இதழில் மைய சமச்சீர்மை படிக்க அமைப்பும் ஈரிசைவியக்க பண்பை பெற்றுள்ளது என அறியமுடிகிறது[25-30]

மையசமச்சீர்மைசாய அடிப்படையாககொண்ட வரிசையில் ஸ்குறின் பற்றி கூறப்பட்டுள்ளது[31].

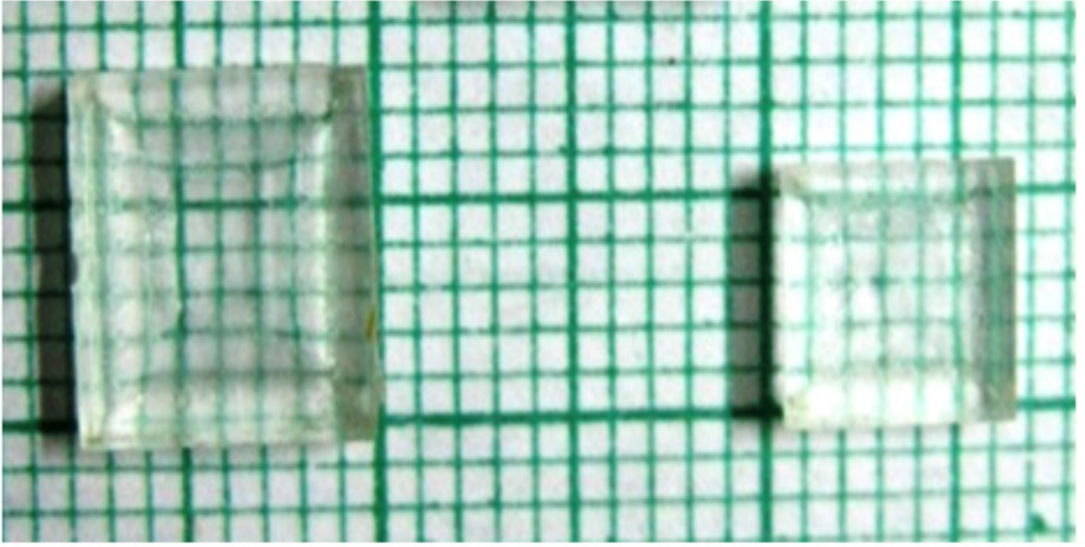
மேற்கூறியவற்றின் அடிப்படையில், புதிய பகுதி கரிம மைய சமச்சீர்மை -டை மெதிலின் அமைன் பிரிடின் பொட்டசியம் குளோரைடு படிக்கமானது பொருளாக்கம் செய்யப்பட்டு கரைசல் மெதுவாக ஆவியாதல் முறையில் வளர்க்கப்பட்டது. வளர்க்கப்பட்ட படிக்கமானது துகள் மற்றும் தனிபடிக்க X-கதிர் விளிம்பு விளைவு, புற ஊதா-கட்புல-அகச்சிவப்பு மற்றும் பூரியர் அகச்சிவப்பு நிலைமாற்று நிறமாலை பண்புகள் மேற்கொள்ளப்பட்டது. வெப்ப, கடினத்தன்மை, மின்காப்பு மாறிலி மற்றும் ஈரிசைவியக்க பண்பு ஆகிய பண்புகள் மேற்கொள்ளப்பட்டது.

2. ஆய்வு செய்முறை

தலைப்பு சேர்மமானது -டை மெதிலின் அமைன் பிரிடின் மற்றும் பொட்டசியம் குளோரைடு ஆகிவற்றை 1 : 1 என்ற விகித அடிப்படையில் தண்ணீர் கரைப்பான் பயன்படுத்தி பொருளாக்கம் செய்யப்பட்டது. 4-DMAPKC ன் பொருளாக்க முறை மற்றும் வினைபாட்டு முறை காட்டப்பட்டுள்ளது .



40 நாட்களுக்கு பிறகு நிறமற்ற 7மிமீ x 6 மிமீ x 2 மிமீ அளவு கொண்ட 4-DMAPKC படிக்கம் வளர்க்கப்பட்டு படம 1ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. 4-DMAPKC ல் ஒரு 4-டை மெதிலின் அமைன் பிரிடின் அயனி மற்றும் ஒரு பொட்டசியம் குளோரைடு அயனி உள்ளது. பொட்டசியம் அயனியானது பிரிடின் நைட்ரஜன் அணு மற்றும் மீதைல் குழு N அணுக்கள் ஹைட்ரஜன் அணுவுடன் பிணைப்பு ஏற்படுத்துகிறது. குளோரின் C-H உடன் பிணைப்பை ஏற்படுத்துகிறது. மீதைல் குழு ஹைட்ரஜன் ஆனது அணுக்களுக்கு இடையேயான மின்னூட்ட பரிமாற்றத்திற்கு காரணம் ஆகும்.



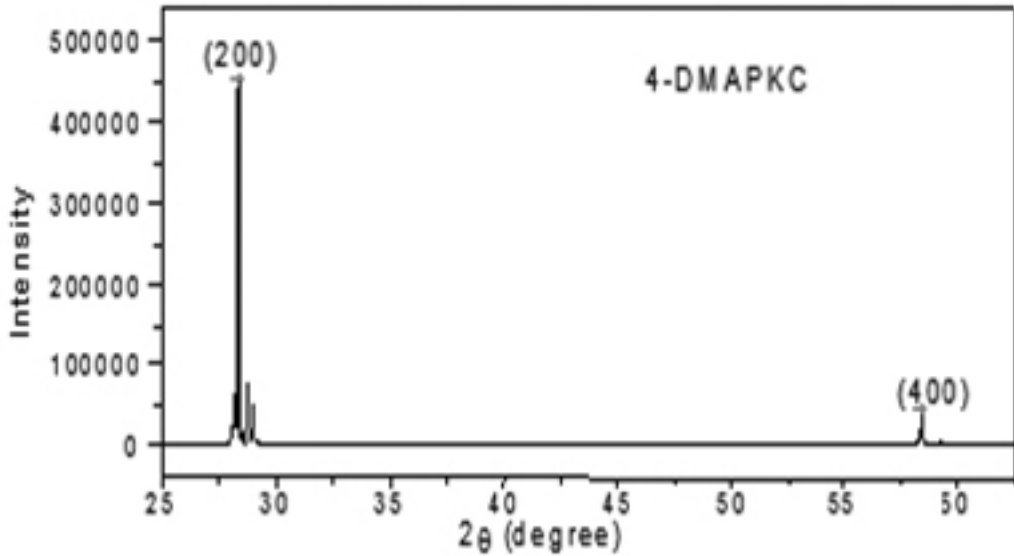
படம்.1 வளர்க்கப்பட்ட 4-DMAPKC தனிப்படிசு

3. பண்பறிதல் ஆய்வு

3.1 துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு

சீராக துகளாக்கப்பட்ட 4-DMAPKC மாதிரி யானது துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்வுக்கு பயன்படுத்தப்பட்டது. மாதிரியானது

10°லிருந்து 60°வரை 2°/நிமிடம் என்ற விகிதத்தில் நுண்ணாய்வு செய்யப்பட்டது. கூர்மையான மற்றும் சரியாக குறிப்பிடப்பட உச்சங்கள் படிகத்தின் படிக அமைப்பு கண்டறியப்படுகிறது. 4-DMAPKC படிகத்தின் துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு படம் 2 ல் காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம்.2 . 4-DMAPKC படிகத்தின் துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு

3.2. தனிப்படி X-கதிர் விளிம்பு விளைவு

நல்ல தரமான 4-DMAPKC தனிப்படிமமானது தனிப்படி X-கதிர் விளிம்பு விளைவுக்கு உட்படுத்தப்பட்டு படிக்கத்தின் அலகு செல்

அளவுருக்கள் கண்டறியப்பட்டன . அவை $a = 3.09 \text{ \AA}$, $b = 3.09 \text{ \AA}$ மற்றும் $c = 3.09 \text{ \AA}$ மேலும் $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ஆகும். இப்படிமமானது கன சதுர வகை மற்றும் மையச்சீரான $P2_1/a$ இடக்குழு வகையை சார்ந்தது.

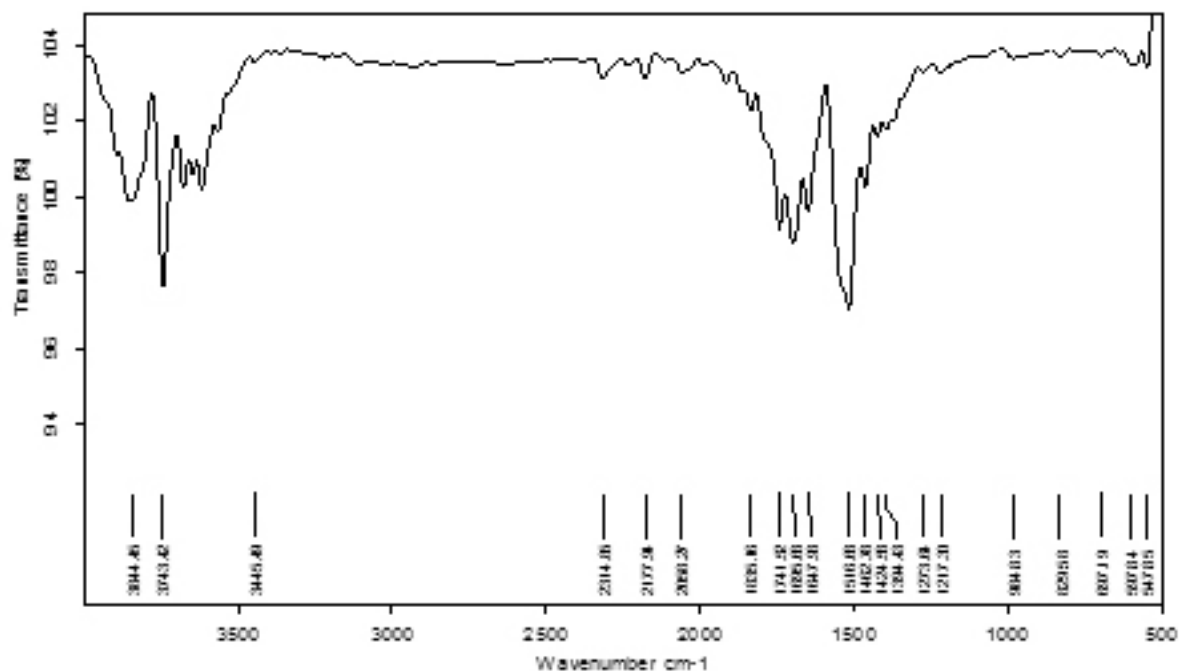
படிகம்	a (Å)	b (Å)	c (Å)	கொள்ளளவு V (Å ³)	படிக வகை
KCl [34]	6.3	6.3	6.3	250	கன சதுரம்
2-APKC [25]	6.19	6.19	6.19	237	கன சதுரம்
4-DMAPKC (தலைப்பு படிகம்)	3.09	3.09	3.09	290	கன சதுரம்

பொட்டாசியம் குளோரைடு படிக்கத்தின் மீது சேர்மானப் பொருட்களின் தாக்கமானது குறிப்பிடப்பட்டுள்ளது [34]. 4-DMAP மற்றும் KCl ஆகிய படிகங்களின் கன சதுர அமைப்பில் எந்த ஒரு மாற்றமும் இல்லை என்பதை காட்டுகிறது மேலும் இவை அட்டவணைப்படுத்தப்பட்டுள்ளது [25]. இங்கு 4-DMAPல் KCl சேர்க்கும் பொழுது செல் கொள்ளளவானது KCl ன் கொள்ளளவை காட்டிலும் அதிகமாக உள்ளது.

3.3 . ஃபூரியர் உருமாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வு

4-DMAPKC படிக்கத்தின் ஃபூரியர் உருமாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வானது KBr தொழில்நுட்பத்தை பயன்படுத்தி $4000-500 \text{ cm}^{-1}$ அலைநீளத்திற்கு இடைபட்ட வரம்பில் பெர்கின் எல்மர் நிறமாலைமானி மூலம் கணக்கிடப்பட்டது. 4-DMAPKC படிக்கத்தின் பதிவு செய்யப்பட்ட உட்கவர்தல் நிறமாலை மூலம் K-N, C=C, N-H

மற்றும் C-H ஆகிய வினைசெயல் தொகுதிகள் கண்டறியப்பட்டு படம் 3 ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. 3445 cm^{-1} ல் உட்கவர்தல் பட்டையானது அமைனின் சமசீரான நீட்டலினால் பெறப்பட்டது. 2058 cm^{-1} ஆனது அரோமாடிக்கினால் உருவானது. 984 மற்றும் 1273 cm^{-1} ல் பட்டையானது C-H வெளி தள வளைதல் அதிர்வினாலும் மற்றும் C-N வளைதல் அரோமாடிக் அமைனினாலும் பெறப்பட்டது. அதே நேரத்தில் C-H தள வளைவானது 1273 cm^{-1} ல் கண்டறியப்பட்டது. N-H வளைவு 1647 cm^{-1} ல் பெறப்பட்டது. மீதைல் குழுவின் சமசீரான நீட்டல் 1462 cm^{-1} லும் C=N நீட்டல் அதே அதிர்வெண்ணில் பெறப்படுகிறது. 1217 cm^{-1} ஆனது (C-N) மற்றும் (C-C) நீட்டலினால் பெறப்படுகிறது. K-N நீட்சியானது 547 cm^{-1} ல் கண்டறியப்பட்டது. இது பிரிடின் வளைய நைட்ரஜன் பிணைப்பு உலோக K^+ அயனியால் ஏற்படுகிறது. பெறப்பட்ட அதிர்வுறு அதிர்வெண்கள் அட்டவணை 2 ல் காட்டப்பட்டுள்ளது.



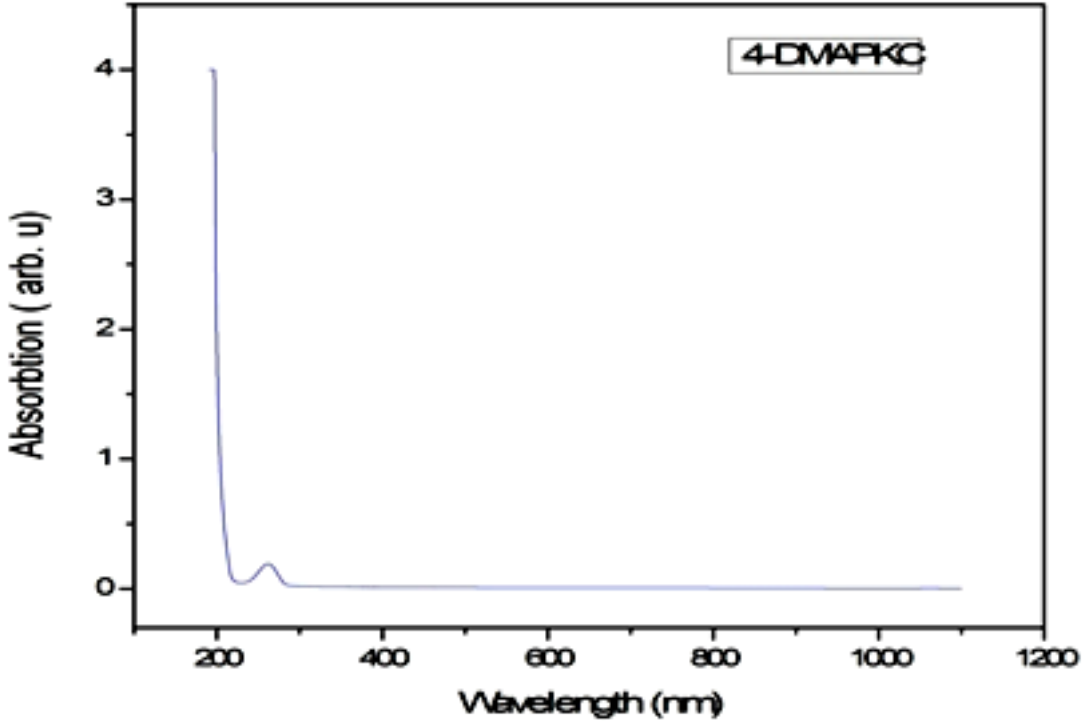
அதிர்வெண் (cm^{-1}) 4-DMAPKC	அதிர்வுகள்
3445	N-H stretching
2177	Aromatic overtone
2058	N-H bending
1647	NH ₂ bending
1516	C = N Stretching mode of pyridine ring
1462	Symmetric bending vibration of methyl group
1424	C-H deformation in CH ₃ group
1394	C-N stretching
1273	Weak C-H plane bending vibration
1217	Strong C-H bending, (C-N) stretching
984	CH bending deformation
829	CH stretching, Cl stretching
547	K-N stretching mode

3.4 புறஊதா-கட்புல நிறமாலை பகுப்பாய்வு

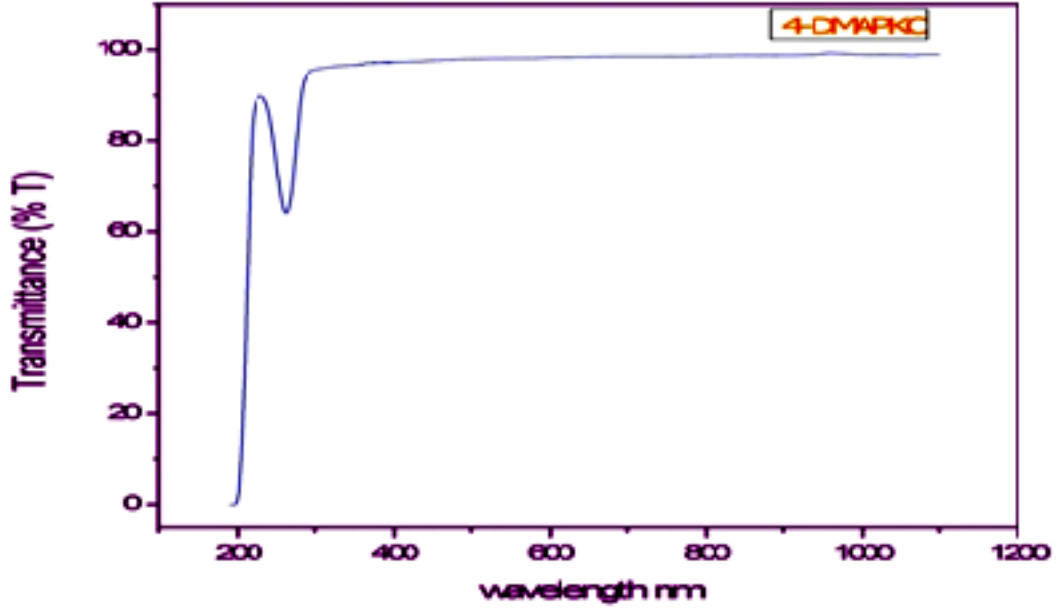
பள பளப்பாக்கப்பட்ட 4-DMAPKC படிகமானது புறஊதா அகச்சிவப்பு கட்புல உட்கவர்தல் நிறமாலை ஆய்வுக்கு 200–1100 nm அலைநீள வரம்பிற்கு உட்படுத்தப்பட்டது. படிகத்தில் π - π^* மற்றும் n - π^* நிலைமற்றதினால் உட்கவர்தல் பட்டை ஏற்படுகிறது. வளர்க்கப்பட்ட 4-DMAPKC படிகத்தில் 260 nm ல் n - π^* நிலைமாற்றத்தில் குறைந்த வலுவுடைய திமில் கண்டறியப்பட்டது. கட்புல பகுதியில் இருந்து புறஊதா பகுதியில் பரந்த ஒளி ஊடுருவும் பொருட்களானது, அதிக ஈரிசைவியக்க பயன்பாட்டிற்கு சிறப்பாக உள்ளது [35]. உட்கவர்தல் நிறமாலை ஆய்வில் புறஊதா அகச்சிவப்பு கட்புல பகுதியில் குறைந்த உட்கவர்தல் மற்றும் தாழ் குறுக்கு வெட்டு அலைநீளம் 261 nm படம் 4 (a) ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. வளர்க்கப்பட்ட 4-DMAPKC படிகத்தின் மற்றும் தாழ் குறுக்கு வெட்டு

அலைநீளமானது அரோமேடிக் வளையத்தில் உள்ள மின்னணுவியல் நிலைமாற்றதால் ஏற்பட்டது. 200 to 400 nm எந்தவித உட்கவர்தலும் இல்லாததால் நேர்ச்சர்பிலா கருவிகள் பயன்பாட்டிற்கு மிகவும் உகந்ததாகும் [36], இதன் காரணமாக 4-DMAPKC படிகமானது நேர்ச்சர்பிலா பயன்பாட்டிற்கு சிறந்ததாகும். 4-DMAPKC படிகமானது 200–1100 nm அலைநீள வரம்பில் நல்ல ஒளி ஊடுருவும் நிறமாலையானது படம் 4(b) ல் காட்டப்பட்டுள்ளது.

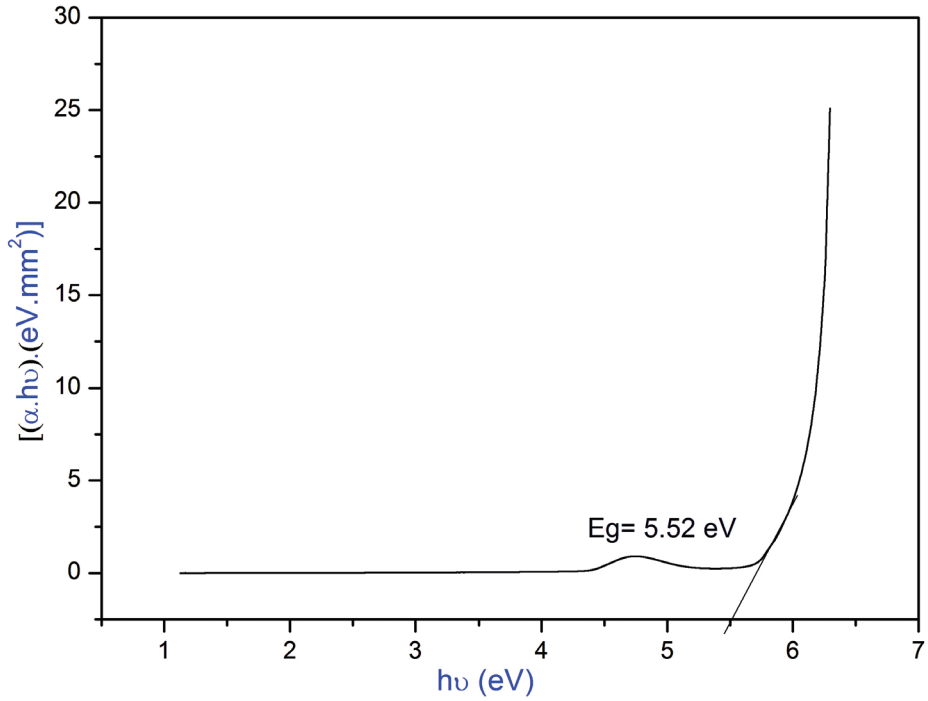
உட்கவர்தலின் அடிப்படையானது, இணைதிறன் பட்டைலிருந்து கடத்துப்பட்டைக்கு மின்னணு கிளர்ச்சியடைவதாகும், மேலும் இது ஒளி பட்டை இடைவெளி கணக்கிடப்பயன்படுகிறது. 4-DMAPKC படிகத்தின் ஒளி பட்டை இடைவெளி படம் 4(c) ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. படிகத்தின் ஒளி பட்டை இடைவெளி மதிப்பு $E_g=5.52$ eV ஆகும்.



படம் 4 (a) உட்கவர்தல் நிறமாலை



படம் 4(b) 4-DMAPKC ஒளி ஊடுருவும் நிறமாலை

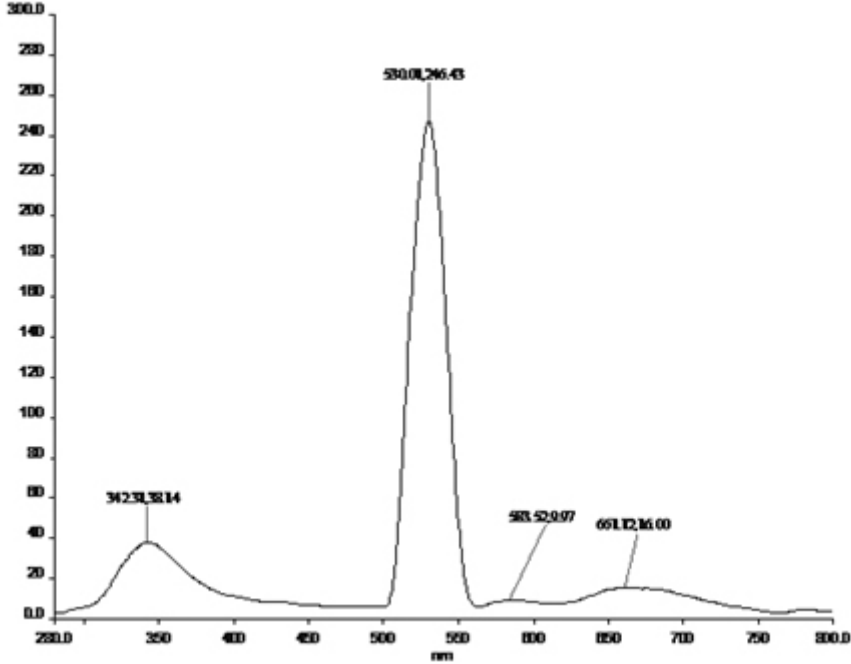


படம் 4(c) 4-DMAPKC படிகத்தின் ஒளி பட்டை இடைவெளி

3.5 ஒளிர்்தல் ஆய்வு

வளர்க்கப்பட்ட படிகத்தின் குறையற்ற கட்டமைப்பு, படிக தரம் மற்றும் ஒளிர்வு தன்மை ஆகியவை ஒளிமுறை ஒளிர்வு மூலம் கண்டறியப்படுகிறது. வளர்க்கப்பட்ட 4-DMAPKC படிகத்தின் ஒளிமுறை ஒளிர்வானது 280 மற்றும் 800 nm க்கு இடையில் பதிவு செய்யப்பட்டு

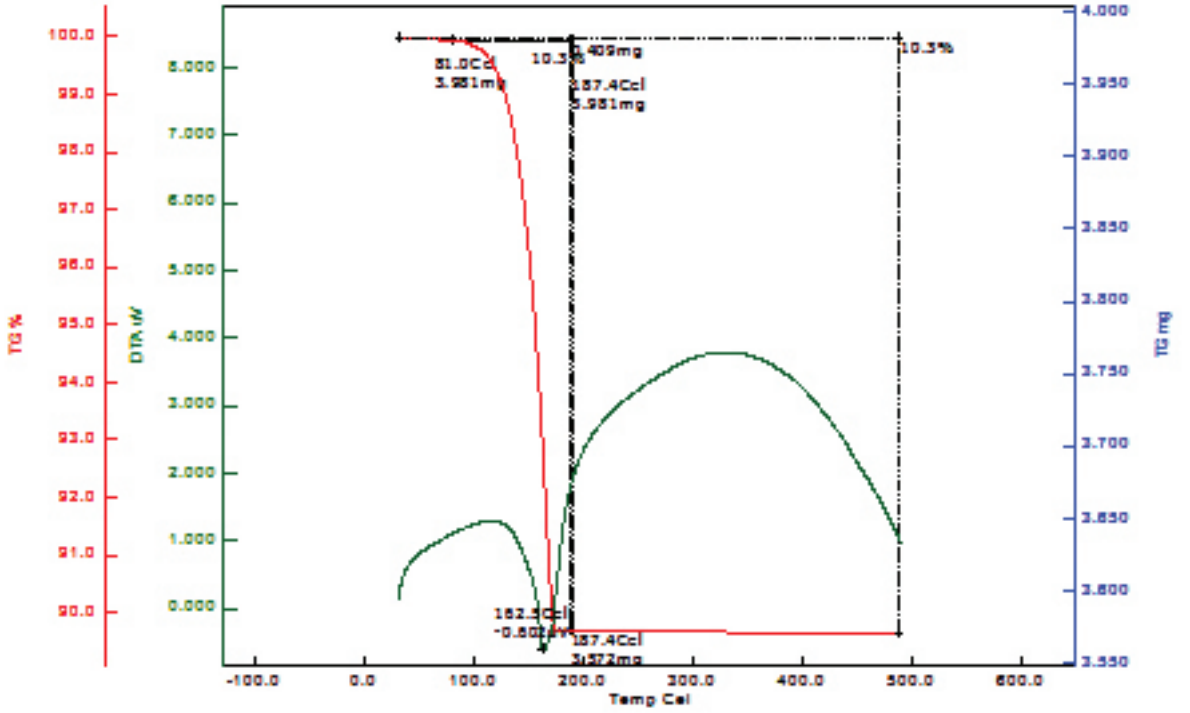
படம் 5ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. உமிழ்வு நிறமாலையிலிருந்து 342 nm ல் நீல ஒளி உமிழ்வு கண்டறியப்பட்டுள்ளது. கூர்மையான மற்றும் செறிவு உச்சம் 530 nm ஆனது பொருளின் பச்சை ஒளி உமிழ்வை உறுதி செய்கிறது. மேலும் மற்றொரு அகன்ற உமிழ்வு உச்சம் 661.12 nm ஆனது படிகம் சிகப்பு ஒளிர்்தல் உமிழ்வை பெற்றுள்ளதை தெரியப்படுத்துகிறது.



3.6 வெப்ப பகுப்பாய்வு

4-DMAPKC இன் வெப்ப நிலைத்தன்மை வெப்ப பருமானிடல் மற்றும் வேறுபட்ட வெப்ப பகுப்பாய்வு மூலம் அடையாளம் காணப்பட்டது. 4-DMAPKC படிக அளவிடப்பட்ட மாதிரிகள் ஒரு Al_2O_3 புடக்குகையில் எடுத்துக்கொள்ளப்பட்டு ஒரு நுண்செயலி இயக்கப்படுகிறது. TG & DTA வளைவுகள் நைட்ரஜன் சூழலில் பதிவு செய்யப்பட்டன. இது சுற்றுப்புற வெப்பநிலைகள் மற்றும் 650°C க்கு (படம் 6) முன்னால் எந்த மாற்றமும் இல்லை. 162.5°C க்கு கீழே எந்த வெப்பங்கொள் அல்லது வெப்ப உமிழ்வு வெப்பநிலையில் மாற்றம். டி.டி.ஏ வளைவில்,

162.5°C இல் வெப்பங்கொள் காணப்பட்டது இது சிதைவு தொடங்குகிறது என்பதனையும் மற்றும் பொருள் 187.4°C முழுமையாக சிதைந்துவிடுவதையும் காட்டுகிறது. TGA வரைபடம் 4-DMAPKC படிகத்தின் சிதைவு வெப்பநிலையில் சித்தரிக்கப்பட்டுள்ளது. தூய படிகத்தின் ஆரம்ப சிதைவு 181°C மற்றும் உயர் சிதைவு 187°C ஆகும். இது முக்கிய சங்கிலியில் ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு இருப்பதால் இருக்கலாம். இந்த வளைவு தூய படிக உருவாக்கம் மற்றும் ஈரப்பதம் இல்லாமல் இருப்பதை சுட்டிக்காட்டியுள்ளது ஏனெனில் வளர்ந்த படிகம் அதிக நிலைத்தன்மையை பெற்றுள்ளது.



படம் 6 . 4-DMAPKC படிகத்தின் வெப்ப பருமனறி பகுப்பாய்வு மற்றும் வகையீட்டு வெப்ப பகுப்பாய்வு

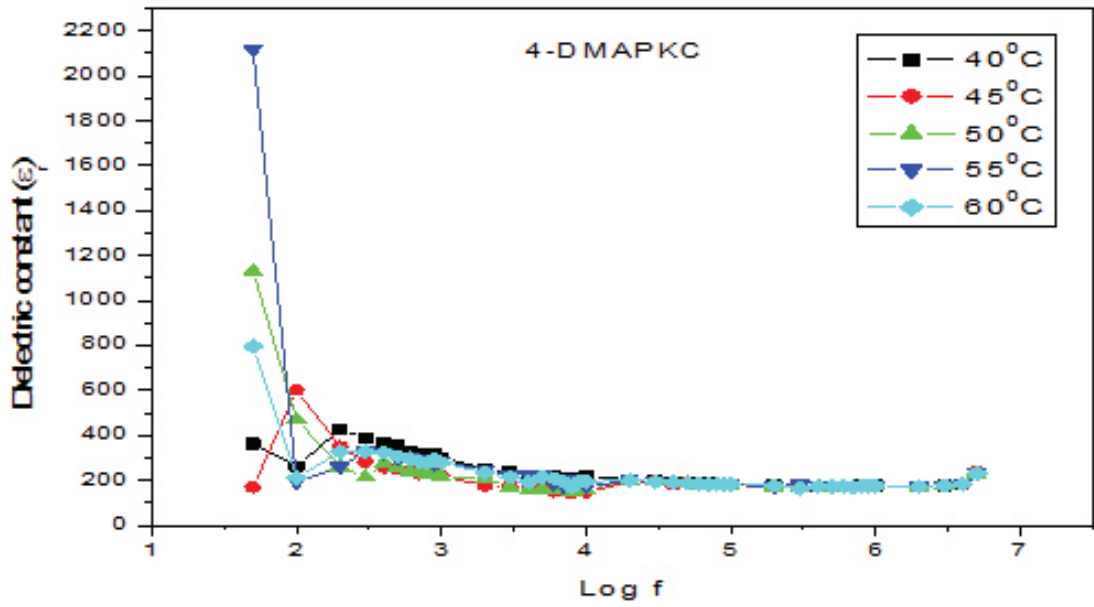
3.7. மின்கடத்தா ஆய்வுகள்

மின்காந்த ஆய்வுகள் ஒரு படிகதிள் உள்ள மின்புலம் பகிர்ந்து கொடுத்தல் குறித்து விவரங்கள் கொடுக்கின்றன. வெவ்வேறு வெப்பநிலைகள் மற்றும் அதிர்வெண்களில் பதிவு செய்யப்பட்ட மின்கடத்தா மாறிலி மற்றும் மின்கடத்தா இழப்பு வேறுபாடுகள் முறையே 7 (அ) மற்றும் 7 (பி) ஆகும். இது குறைந்த அதிர்வெண் 50 ஹெர்ட்ஸ் மற்றும் 55 °C வெப்பநிலையில் மின்கடத்தா மாறிலி 2116.95 அதிக மதிப்பு கொண்டது. உயர் அதிர்வெண் (5 மெகாஹெர்ட்) பகுதியில் 233.21 விரைவாகக் குறைகிறது (படம் 7 (அ)). குறைந்த அதிர்வெண் கொண்ட மின்காந்த மாறாவின் உயர் மதிப்புகளானது, நான்கு துருவப்படுத்துதலின் காரணமாக இருக்கலாம் அவை முறையே பங்களிப்பு என்பது,

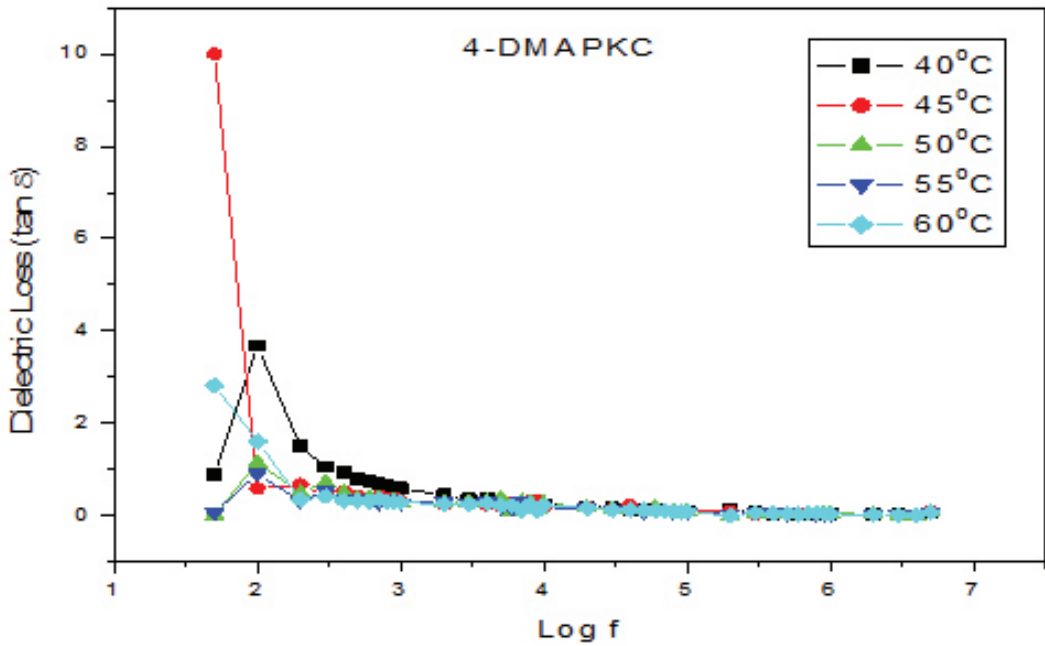
இட மின்சுமை, மின்னணு, இருமுனை மற்றும் அயனி துருவப்படுத்தல் [37].

எனவே, 4-DMAPKC படிகத்தின் அதிக அதிர்வெண் குறைந்த மின்கடத்தா மாறிலி மதிப்புகள் காரணமாக இது மேம்பட்ட ஒளியியல் தரத்தை கொண்டுள்ளது. மின்சக்தி இழப்பு அளவை மதிப்பீடு செய்வதற்கு மின்கடத்தா இழப்பு படம் 7 (பி) காட்டப்பட்டுள்ளது.

4-DMAPKC படிகத்தின் குறைந்த மின்கடத்தா இழப்பு உயர்ந்த ஒளியியல் தரத்தை வரையறுக்கிறது மற்றும் மின்சாரம் குறைவான செயலில் செறிவு குறைபாடுகள் உள்ளதை கட்டுகிறது. இது NLO பயன்பாடுகளுக்கான முக்கிய அளவுருவாகும் [38]



படம் 7 4-DMAPKC படிகத்தின் மின்காப்பு மாறிலி

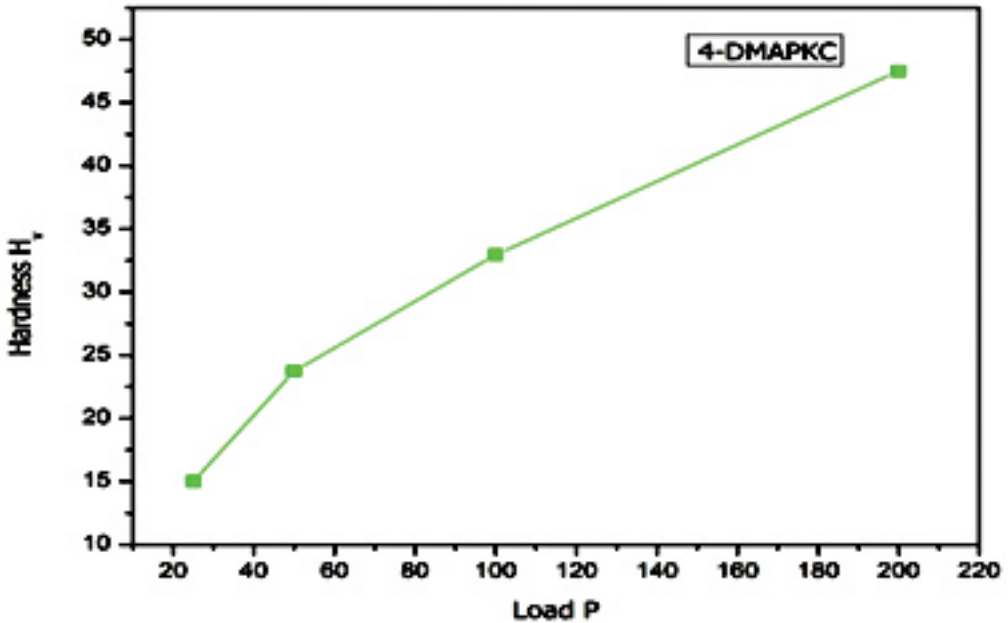


படம் 7 4-DMAPKC படிகத்தின் மின்காப்பு இழப்பு

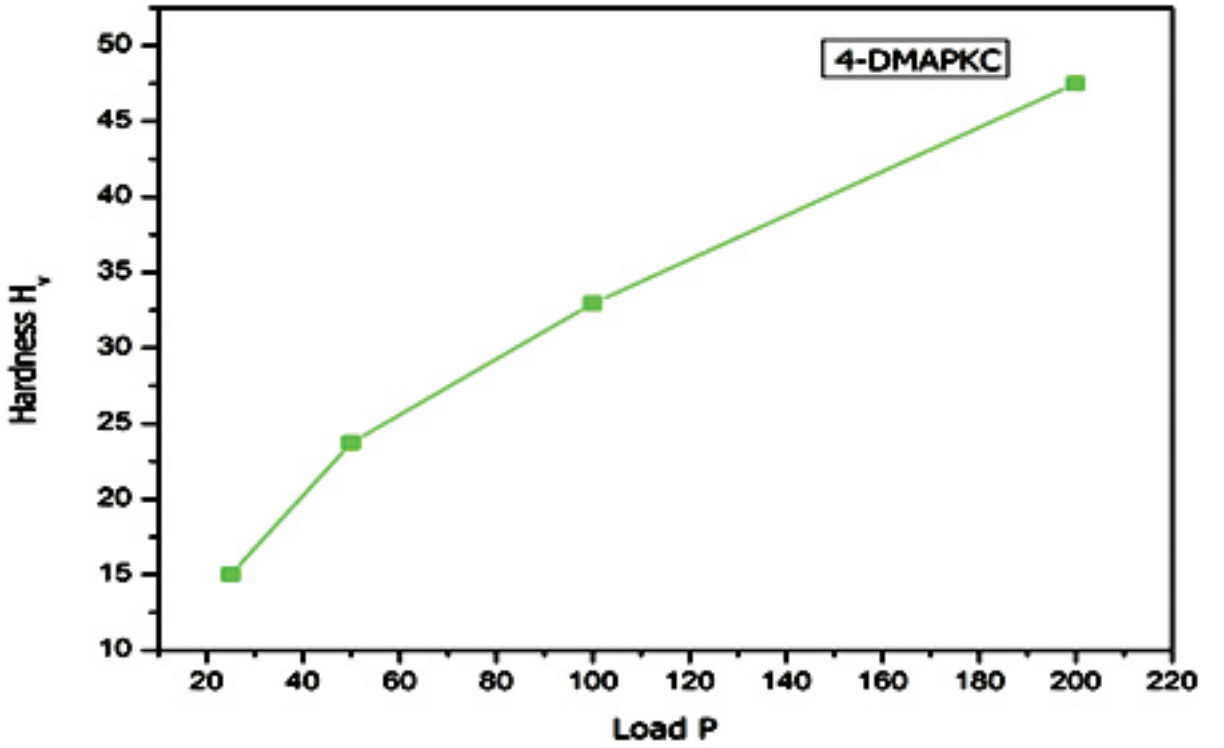
3.8. நுண் கடினத்தன்மை சோதனை

வளர்ந்த படிக்கத்தின் கடினத்தன்மை மதிப்புகள் விக்ஃர்ஸ் நுண்கடினத்தன்மை சோதனை மூலம் மதிப்பிடப்பட்டன. முக்கிய தளத்தின் மீது அறை வெப்பநிலையில் உள்ளீடுகள் செய்யப்பட்டன. 20 கிராம் முதல் 200 கிராம் வரையிலான எடையை (பி) மாற்றுவதன் மூலம் உள்தள்ளல் குறிப்புகள் மேற்பரப்பில் செய்யப்பட்டன. உள்தள்ளல் தோற்றத்தின் மூலவிட்ட நீளம் லீட்ஸ் மெட்டாலக்ஸ் II (Leitz Metallax II) நுண்ணோக்கி பயன்படுத்தி அளவிடப்பட்டுள்ளது. ஒவ்வொரு பொருளின் எடையைக்கும் துல்லியமான அளவீடுகளைப் பெறுவதற்கு மூன்று உள்தள்ளல்கள் மாதிரிகள் தயாரிக்கப்பட்டு, உள்தள்ளப்பட்ட பதிவுகள் சராசரிமூலவிட்டநீளங்களாக (n) கருதப்பட்டன.

கடினத்தன்மை எண் மாறுபாடு படம் 8 (அ) இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. வளர்ந்துள்ள படிமானது தலைகீழ் உள்தள்ளல் அளவு விளைவுகளைப் பொறுத்து மாறுபடும், இது கடினத்தன்மையானது எடை அதிகரிப்பதை பொருத்து அதிகரிக்கும் என்பதை காட்டுகிறது [39]. 'n' ஐக் கணக்கிட, படம் 8 (b) இல் காட்டப்பட்டுள்ளபடி, $\log d$ மற்றும் $\log P$ இடையே ஒரு வரைபடம் வரையப்படுகிறது. இது குறைந்தது சதுர பொருத்தப்பட்ட வளைவின் சாய்வு 'n' மதிப்பைக் கொடுக்கிறது, மேலும் அது 4-DMAPKC படிக்கத்திற்கு 0.5 என கண்டறியப்பட்டது. வளர்ந்துள்ள படிக்கத்திற்கான 'n' பெறப்பட்ட மதிப்பு, 1.6 க்கு குறைவாக உள்ளது (அதாவது, 0.5), எனவே வளர்ந்துள்ள படிமானது கடின வகை [40-41] ஆகும். வளர்ந்த படிமானது நேர்சார்பிலா ஒளியியல் பயன்பாடுகளுக்கு பயனுள்ளதாக இருக்கும்.



படம் 8 (a) 4-DMAPKC படிக்கத்தின் எடை மற்றும் கடினத்தன்மை எண் வரைபடம்



படம் 8 (b) 4-DMAPKC படிகத்தின் log P மற்றும் log d வரைபடம்

3.9 ஈரிசைவியக்க திறன்

ஈரிசைவியக்க திறனை அளவிடுவதற்கு மாற்றியமைக்கப்பட்ட குவார்ட்ஸ்-பொரி தூள் நுட்பம் பயன்படுத்தப்பட்டது, இதில் Q-நிலைமாற்று விசை Nd: YAG கிளர் கதிர் ஒளிமி (Quanta ray series) 1064 நானோஇல் 10 ஹெர்ட்ஸ் துடிப்பு திருப்பு வீதத்துடன் வேலை செய்யப்படுகிறது. [42]. 4-DMAPKC படிக மாதிரி நல்ல தூள்ளாக்கப்பட்டு இரண்டு வெளிப்படையான கண்ணாடி காட்சி வில்லைகளுக்கு இடையே இறுக்கமாக இணைக்கப்பட்டுள்ளது.

இது ஒற்றை நிறமாக்கிமீட்டர் கிளர் கதிர் ஒளிமி கற்றை பாதையில் 0.68 J வைக்கப்பட்டுள்ளது. மாதிரியின் அலைநீளம் $\lambda = 532$ nm பசுமை ஒளி வெளிச்ச வெளியீடானது ஈரிசைவியக்க திறனை (2ω) உறுதிப்படுத்துகிறது. 4-DMAPKC இன் ஈரிசைவியக்க திறனானது 4-டிமித்திலமினோபிரிடைன்டைன் மற்றும் பொட்டாசியம் குளோரைடு (4-DMAPKC)

ஆகியவற்றிற்கு இடையே உள்ள இடைப்பட்ட மின்விசையின் பரிமாற்றம், 4-DMAP மூலக்கூறு இணைப்பில் உள்ள மீத்தல் குழு மற்றும் 4-DMAPKC படிகத்திற்கும் இடையே ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு, கரிம 4-DMAP மற்றும் கனிமனுக்கும் இடையேயான சமச்சீர்ற்ற பொட்டாசியம் குளோரைடுடன் இணை இருமுனை கணம், 4-DMAPKC படிகத்தின் ஒற்கறை அடுக்கு இடைமுகங்களுக்கு இடையேயான சமச்சீர் உடைப்பு, 4-DMAP மின்சுற்றுக்கும் உலோகத்திற்கும் இடையில் உள்ளிழுக்கப் பரிமாற்ற பரிமாற்றம் (LMCT) மற்றும் 4-DMAPKC இன் π -எலக்ட்ரான் மேக அடர்த்தியின் சமச்சீர்ற்ற பரிமாற்றம் போன்றவை ஈரிசைவியக்க திறனாக்கு காரணமாகும். 4-DMAPKC ஈரிசைவியக்க செயல்திறனானது 0.69 முறை கனிம KDP யை விட அதிகமாகும். 4-DMAPKC படிகத்தை மற்ற வழக்கமான நேர்சார்பிலா ஒளியியல் படிகங்களைப் போன்று நேரியல் பயன்பாட்டிற்கு பயன்படுத்தலாம்.

4. முடிவு

நேர்சார்பிலா ஒளியியல் அரைக்கனிம 4-டிமிதிமிலாபிரிடென் பொட்டாசியம் குளோரைடு (4-DMAPKC) ஒற்றை படிகமானது மெதுவாக ஆவியாதல் கரைசல் வளர்ச்சி நுட்பத்தை கொண்டு வளர்க்கப்பட்டது. வளர்ந்த 4-DMAPKC படிகமானது தூள் மற்றும் ஒற்றை படிக X-கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்வுகளுக்கு உட்படுத்தப்பட்டது. 4-DMAPKC படிகத்துடன் மையசீரான கன அமைப்பு மூலம் 4-டிமெமிலிலிமின்பிரிபிகிடைன் படிக அணிகோவையுடன் KCl அயனையை இணைக்கிறது. ஃபிரியார் உருமாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலை ஆய்வானது வளர்ந்த படிகத்திலுள்ள பல செயல்பாட்டு குழுக்களை உறுதிப்படுத்துகிறது. புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு ஆய்வானது, 200 nm

முதல் 1100 nm வரை அலைநீளம் 261 nm ஐ வெட்டப்பட்டதாக பரந்த ஒளி வெளிவிடு பரிமாற்றத்தைக் காட்டுகிறது. ஒளியியல் பட்டை இடைவெளி ($E_g = 5.52$ eV) புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை தரவைப் பயன்படுத்தி கணக்கிடப்பட்டது. TG-DTA பகுப்பாய்வுகளைப் பயன்படுத்தி வெப்ப பண்புகள் மேற்கொள்ளப்பட்டன. வெவ்வேறு வெப்பநிலையில் அதிர்வெண் சார்பாக மின்கடத்தா மாறிலி மாறுபாடுகள் விவாதிக்கப்பட்டன. விக்ரஸ் நுண்கடினத்தன்மை ஆய்வுகள் கொண்டு கடினத்தன்மை எண் (Hv) கணக்கிடப்பட்டது. ஒரு புதிய வகை மையசீரான 4-டி.எம்.ஏ.பீ.ஏ.சி. நேர்சார்பிலா ஒளியியல் படிகத்தின் கவனிக்கத்தக்க மதிப்பு எதிர்காலத்தில் பல சிறந்த ஆராய்ச்சி கோட்பாடு மற்றும் பரிசோதனையை வழங்கலாம்.

REFERENCE:

1. D. Wang, G. Zhou, X. Xu, X. Wang, H. Liu, Y. Ren, Z. Shao and M. Jiang, *Opt. Laser Technol.*, 2002, 34, 343-346.
2. M. H. Jiang and Q. Fang, *Adv. Mater.*, 1999, 11, 1147-1151.
3. J. Badan, R. Hierle, A. Perigaud and J. Zuss (Eds.), *Non-linear Optical Properties of Organic Molecules and Polymeric Materials*, American Chemical Symposium Series 233, American Chemical Society, Washington. DC, 1993.
4. M. D. Aggarwal, J. Choi, W. S. Wang, K. Bhat, R. B. Lal, A. D. Shields, B. G. Penn and D.V. Frazier, *J. Cryst. Growth.*, 1999, 179, 2004.
5. Ying L, Zhi Ru L, Di W, Rui Yan L, Xi Yun H, Chia Chung S. *J. phys. Chem.* 2004; B 108: 3145.
6. Collins R.J., Nelson D.F., Schawlow A.L., Bond W., Garrett C.G.B., and Kaiser Coherence W., Narrowing, Directionality, and Relaxation Oscillations in the Light Emission from Ruby, *Phys. Rev. Lett.* 5 (1960) 303-305.
7. Dongfeng Xue and Henryk Ratajczak, Constituent chemical bonds and nonlinear optical coefficients of Na₂SeO₄·H₂SeO₃·H₂O molecular crystal, *Chemical Physics Letters*, 371 (5- 6) (2003) 601-607.
8. Dongfeng Xue and Siyuan Zhang, Effect of hydrogen bonds on optical nonlinearities of inorganic crystals, *Chemical Physics Letters*, 301(5-6) (1999) 449-452.
9. N. Horiuchi, F. Lefauchaux, A. Ibanez, D. Josse, J. Zyss, Quadratic nonlinear optical coefficients of organic inorganic crystal: 2-amino-5-nitropyridinium chloride, *J. Opt. Soc. Am. B* 19 (8) (2002) 1830.
10. Daqiu Yu, Dongfeng Xue, Henryk Ratajczak, Bond-valence parameters for characterizing O- H...O hydrogen bonds in hydrated borates, *Journal of Molecular Structure*, 792 (2006) 280-285.
11. G. Xing, M. Jiang, Z. Shao, D. Xu, *Chin. J. Lasers* 14 (1987) 357.
12. S. Velsko, *Laser Program Annual Report*, Lawrence UCRL-JC 105000, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1990.
13. L.F. Warren, *Electronic materials-our future*, in: R.E. Allred, R.J. Martinez, K.B. Wischmann (Eds.), *Proceedings of the Fourth International Sample Electronics Conference*, Society for the Advancement of Material and Process Engineering, Covina, CA, 1990, Vol.4, p. 388.
14. H. Q. Sun, D. R. Yuan, X. Q. Wang, X. F. Cheng, C. R. Gong, M. Zhou, H. J. Xu, X. C. Wei, C. N. Luan, D.Y. Pan, Z. F. Li and X. Z. Shi, *Cryst. Res. Technol.*, 2005, 40, 882-886.

15. D.S. Chemla, J. Zyss, Nonlinear optical properties of organic molecules and crystals, Quantum Electronics. Principles and Applications, Vol. 1(a), Academic Press. Inc, 1987. pp. 23-191.
16. J.F. Nicoud, R.J. Twieg, Nonlinear optical properties of organic molecules and crystals, Quantum Electronics. Principles and Applications, Vol. 1(b), Academic Press. Inc, 1987. pp. 227-296.
17. M. Barzoukas, M. Blanchard-Desce, D. Josse, J.M. Lehn, J. Zyss, Very large quadratic nonlinearities in solution of two push-pull polyene series: effect of the conjugation length and of the end groups, Chem. Phys. 133 (1989) 323- 329.
18. M. Hanack, M. Lang, Conducting stacked metallophthalocyanines and related compounds, Adv. Mater. 6 (1994) 819.
19. A.M. guloy, Z.Tang, P.B.Miranda, V.I.Srdanov, Adv.mater 13(2001)833.
20. B.B. Koleva, T. Kolev, R. Seidel, M. Spitteller, W.S. Sheldrick, Spectrochim. Acta, Part A 71 (2008) 695.
21. Srinivasan, P., Kanagasekaran, T., Vijayan, N., Bhagavannarayana, G., Gopalakrishnan, R., Ramasamy, P., Studies on the growth, optical, thermal and dielectric aspects of a proton transfer complex-Dimethyl amino pyridinium 4-nitrophenolate 4-nitrophenol (DMAPNP) crystals for non-linear optical applications. Optical Materials, 30 (2007) 553-564.
22. Manivannan, S., Dhanuskodi, S., Synthesis, growth, structural, optical, and thermal properties of a new semiorganic crystal: 4-dimethylamino pyridinium dihydrogen phosphate. Crystal growth and design, 4 (2004) 845-850.
23. Ennaceur, N., Henchiri, R., Jalel, B., Cordier, M., Ledoux-Rak, I., Elaloui, E., Synthesis, crystal structure, and spectroscopic characterization supported by DFT calculations of organoarsenic compound. J.of Mol. Structure, 1144 (2017) 25-32.
24. Henchiri, R., Ennaceur, N., Cordier, M., Ledoux-Rak, I., Elaloui, E., Synthesis, X-Ray crystal structure and highly nonlinear optical properties of inorganic-organic compound: 1,4-Diazbicyclo-octane oxonium trinitrates single crystal. J. of Physics and Chemistry of Solids, 106 (2017) 58-64.
25. R. Srineevasan, R. Rajasekaran., Growth and Characterization of new centrosymmetric 2-aminopyridine potassium chloride single crystal for NLO Applications, Elixir Crystal Growth, 66 (2014) 20551-20555.
26. T. Dhanabal, et al., Synthesis, spectral, thermal, optical and dielectric studies on 4-dimethylaminopyridinium picrate crystals, Optik - Int. J. Light Electron Opt. (2014), <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijleo.2014.03.027>>.
27. M. Rajkumar, M. Saravanabhavan, A. Chandramohan., Synthesis, structural, thermal, mechanical, second harmonic generation efficiency and laser damage threshold studies of 4-dimethylaminopyridinium-3,5-dicarboxybenzoate trihydrate single crystal., Optical Materials 72 (2017) 247-256.

28. Peng Ren, Jingui Qin, Fuying Du, Tao Liu., *Inorganic Chemistry Communications* 6 (2003) 1375-1377.
29. Thangaraj,M., Ravi, G., Sabari Girisun,T.C., *Ethylenediaminium di(2-nitrophenolate) single crystals as materials for optical second harmonic generation. Phys B : Condensed Mat.* 449 (2014) 209-213.
30. T. Ishihara, K. Koshino, H. Nakashima, *Second harmonic generation due to quadrupole interaction in a photonic crystal slab: angle dependence and symmetry of the unit cell, Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 253901-253911.
31. Lüpke, G., Bottomley, D. J., van Drile, H. M., *Second- and third-harmonic generation from cubic centrosymmetric crystal with vicssinal faces: phenomenological theory and experiment, J. Opt. Soc. Am. B,* 11(1994) 33-43.
32. Ashwell, G. J., Jefferies, G., Hamilton, D. G., Lynch, D. E., Roberts, M. P. S., Bahra, G. S., Brown, C. R., *Strong second-harmonic generation from centrosymmetric dyes. Nature,* 375 (1995) 375-385.
33. Guo Wensheng, Guo Fang, Wei Chunsheng, Liu Quito, Zhou Guangyong, Wang Dong, Shao Zhongshu, *Sci. China Ser. B:Chem;* 45 (2002), p. 276.
34. Xiaofu GUO, Junsheng yuan, Zhiyong Ji, Min SU, *Front:Chem. Eng. China* 4(1) (2010) p.78.
35. M. Ambrose Rajkumar., S. Stanly John Xavier., S. Anbarasu., Prem Anand Devarajan., *Growth and characterization studies of an efficient semiorganic NLO single crystal: 2-Amino 5-nitropyridinium sulfamate (2A5NPS) by assembled temperature reduction (ATR) method., Optical Materials* 55 (2016) 153-159.
36. Le Fur Y., Masse R., Cherkaoui M.Z., Nicoud J.F., *Z. Kristallogr* (1993) 856.
37. A.M. Badr, H.A. Elshaikh, I.M. Ashraf, *J. Eng. Technol. Res.* 3 (2011) 62.
38. K. Boopathi, P. Rajesh, P. Ramasamy, *Investigation on growth, structural, optical, thermal, dielectric and mechanical properties of organic l-prolinium trichloroacetate single crystals, Mater. Res. Bull.* 47 (9) (2012) 2299-2305.
39. K.sangwal, *on the reverse indentation size effect and microhardness measurements of solids, mater.chem.phys.*63(2)(2000)145-152.
40. Onitsch E. M., *Mikroskopie,* (1947) 2, 131.
41. Kishan Rao K., Surender V., Sabitha Rani B., (2002) *Bull Mater. Sci.,* 25.
42. S.K. Kurtz, T.T. Perry, *A powder technique for the evaluation of nonlinear optical materials, J. Appl. Phys.* 39 (1968) 3798-3813.

(2E) -3- (4- (4-மெத்தோகார்ட்டிஸ்ட்ரிஎல்) பிஹைல்) -2-

சனோனோராரிலிக் சாய உணர்ச்சி திறன் தூரிய மின்கலத்தின் செயல்திறனை அமிலத்தின் DFT மற்றும் TD-DFT பயன்படுத்தி மேம்படுத்துதல்

மு. அர்ஜுன்குமார் ¹, இ. ராகவன்², மா. பிரகாசம்
 அ. பிரகாசம் ² மற்றும் பொ. மு. அன்பரசன் ³.

¹ திப்தியல் தளந் திப்தியல் அளந் அளந் அளந் அளந் அளந் - ன ன: திப்திய
² திப்தியல் தளந் திப்தியல் அளந் அளந் அளந் அளந் அளந் - ன ன: திப்திய

சாய உணர்ச்சி திறன் தூரிய மின்கலங்களில் (DSSC கள்) வகை (a) - (b) - (c) ன்று கட்டமைப்புகளை கொண்டு கலவை சமச்சீரற்ற தன்மையையும், பன்முகமையும் வழங்கி திறமையான ஒளி அளவளவு மற்றும் உணர்ச்சி திறன் கொண்டு செயல்படுகின்றன. இது ஒரு முக்கியமான செயல்திறன் எலக்ட்ரான் ஒளி உட்படுத்தும் (a) முக்கியமான செயல்திறன் கொண்ட பொறிமுறைகளும். (2E)-3-4-(4-மெத்தோகார்ட்டிஸ்ட்ரிஎல்) பிஹைல்) -2-சனோனோராரிலிக் அமிலத்தின் முல்கூறின் உகந்தினை, மின்னணு கட்டமைப்புகள், துருவமுனைப்புகள் மற்றும் கரிம சாய உணர்ச்சி திறன் ஆகியவற்றை ஹைட்ரி-டாக் (H) மற்றும் அடர்த்தி செயல்பாட்டு கோட்பாடு (DFT) மூலம் ஆராயப்படுகிறது. புற ஊழலாட்சி (PV) திறமையை, நேரம் சார்ந்த அடர்த்தி செயல்பாட்டுக் கோட்பாடு (TD-DFT) மூலம் ஆராயப்பட்டது. கோட்பாட்டு முடிவுகள், மின் முனைவாக்க தொடர்ச்சி மாதிரி (PCM) பயன்படுத்தி உகந்த ஆற்றல்கள், உறிஞ்சுதல் மற்றும் முல்கூறுகளின் உகந்த திறமையை ஆகியவற்றைக் கணிப்பதற்கான சிறந்த மதிப்பீடு வன்பதைக் காட்டுகிறது. நேரம் சார்ந்த - அடர்த்தி செயல்பாட்டு கோட்பாடு கணக்கீடுகளின் அடிப்படையில், கணக்கீடு மற்றும் அளவளவையில் உள்ள அகச்சிவப்பு மண்டலங்களில் உள்ள மின்னணு திற மாலையில் தனிச் சிறப்புகள் பெறப்பட்டுள்ள உறிஞ்சுதல் பட்டிகள் H-2 ண்க்ட்ரான் நிலைமைமற்றங்களால் உருவாக்கவை என ஆராயப்படுகிறது.

முக்கிய வார்த்தைகள்: சாய உணர்ச்சி திறன் தூரிய மின்கலங்கள், அடர்த்தி செயல்பாட்டுக் கோட்பாடு, நேரம் சார்ந்த அடர்த்தி செயல்பாட்டுக் கோட்பாடு, சாய உணர்ச்சி திறன், மின்னணு மற்றும் உறிஞ்சுதல் திறமையை.

1. அறிமுகம்

தற்போதிருக்கும் விஞ்ஞான ஆராய்ச்சிகளில், சாய உணர்ச்சி திறன் தூரிய மின்கலங்கள் (DSSCs) அவற்றின் எளிதான கட்டுமானம், குறைந்த விலை போன்ற (1-5) பண்புகளால் முக்கியமானதாக அறியப்படுகின்றன. DSSC இன் முக்கிய நன்மை, போட்டான்லிபெரேஷன் மின்சாரம் எடுக்கும் (PCE) தற்போதைய மாற்று திறனை மேம்படுத்துவதாகும். TiO₂ குறைக்கடத்தியின்

பரந்த பட்டை இடைவெளிக்கு எலக்ட்ரானை பரிமாற்றுவதற்கும் ஒளியை உறிஞ்சுவதற்குமான திறனை உணர்திறனிகள் பெற்றிருக்க வேண்டும். ஒரு அயோடிடு / டிரை அயோடைட் ரெடாக்ஸுடன் (R / I₃) கொண்டிருக்கும் கரிம மின்பகுளி கரைப்பான், போட்டான் ஆக்ஸிஜனேற்ற சாய முல்கூறுகளின் மீளுருவாக்கத்திற்கு காரணம் ஆகிறது. ஒளி வேதியியல் சாதனத்தின் செயல்பாட்டிற்கு, எதிர் மின்னழுத்த சமனியானது ஒளியியல் எலக்ட்ரோடைட்டு கொண்டு முடப்படுகிறது. அதேபோல் TiO₂ நானோ துகள்களுக்கு இடையில்

உள்ள வெற்றிடம் மின்னாற்பகுதித் தீர்வை கொண்டு நிரப்பப்படுகிறது. [2]. DSC கள் சிறந்த ஆற்றல் மாற்றத்தைக் காட்டினாலும், நீடித்த நீராவி அல்லது கசிவு போன்ற நிலைத்தன்மை மற்றும் நீண்ட கால சிக்கல்கள், அதே போல் மின்னாற்பகுப்பின் அல்லது சாயத்தின் சீரழிவு ஆகியவற்றால் அவை இன்னும் வணிகரீதியான குறைவான பயன்பாடு களை பெற்று இருக்கின்றன. இந்த குறைபாடுகளை சமாளிக்க, திரவ மின்பகுளிகளை விட திட மின்பகுளிகளே சிறந்தது.

உணர்வ மூலம் எரிவ சாயங்களில் D-A கட்டமைப்பு மூலக்கூறுகள் வலுவான வலுவியல், மின்னணு அமைப்பு (π-π) புகைபடுபு பகுதி, ஒளி அழிவுகூட செயல்திறம், π-π திறம் மற்றும் சிறப்பான செயல்திறம் ஆகியவைகளை பெற்று உள்ளன. இந்த கட்டுமானத்தில் உண்மூலக்கூறு D-A கட்டமைப்பை அடிப்படையாகக் கொண்டது. இந்த D-A கட்டமைப்பில் எலக்ட்ரான் -சமன் மூலக்கூறுகளும், அமைப்பு மற்றும் செதில் குறு போன்றவை வழங்கியாகவும் செயல்படுகிறது. இந்த மூலக்கூறுகளின் சில பண்புகள் சிறு செயல்திறமடையுள்ளன. சம உணர்வ திறமற்றிய மிகைல துணுதில், எலக்ட்ரான் மிகவும் விரிவாக ஆய்வு செயல்பட்ட எரிவ கைவைகளில் ஒளிவாழ்வு. இந்த மூலக்கூறில் தொடர்புடைய ஆய்வுகள் காரணங்களில் ஒன்று ஒளி வேதி துணுதலில் ஒத்திசைவு ஆகும். இந்த செயல்முறைகள் பற வேதி மாற்றங்கள் மற்றும் அவற்றின் கைப்பாள் கார்பு ஆகியவற்றை பரிந்து கொண்டதற்கு மட்டுமல்லாமல், அவை கட்டி செயல்முறையில் உள்ள முக்கிய பகுதிகளைய நாம் அறியவும் பயன்படுகின்றது. எலக்ட்ரான் மற்றும் எலிமினேட்டி கைவைகள் உண்மையில் ஒளி வேதி சிஸ் - டிரான்ஸ் இன் ஆய்வு உதாரணங்கள் ஆகும். உயிரியல் ஒளி வாய்க் அமைப்புகளின் மாற்றியமைப்பும் அவை செயல்படுகின்றன. ஆய்வுகூட கட்டி எலிமினேட்டி, வேசர் சாயம், வேதியியல் ரீதியாக, குறுகிய இடைக்காலகட்டி பாலிமர்ஸ் போன்ற ஒளிவியல் மற்றும் மின் ஒளிவியல் பயன்பாடுகளில் பயன்படுத்தக்கூடிய கரிம பொருட்களுக்கான கட்டுமான தொகுதிகளாகவும் எலக்ட்ரான் உரிவது, தொலைத்தொடர்பு ஆய்வுகூட கட்டுப்பாட்டில்.

மற்றும் ஆய்வுகூட சமீகைடு செயல்திறத்தின் எந்தியமான பயன்பாடுகளின் காரணமாக, பெரிய இடைக்காலகூட வரிசை ஒழுங்குமுறை ஒளிவியல் பகுதிகை (அ) வெளியேற்றும் பொதுவான வெவமைப்பு மற்றும் செயல்பாட்டில் குறிப்பிடத்தக்க அளவில் பயன்படுத்தப்படுகிறது. இந்த பயன்பாடுகளில் உயர் வேதியல்சார ஒளிவியல் π-π திறவுகூட கூடிய வெவ வலுவான பொருட்களை உதவக்கூட பயன்படுகிறது. குறிப்பிட்ட பயன்பாடு பொறுத்து கரிம பொருட்கள் பயன்பாடு வழக்கமான கைவ பகுதிகை களை விட குறிப்பிடத்தக்க தகைமைகளை வழங்குகிறது. கட்டி ஆய்வுகளில், பெரிய மூலக்கூறு அலுபுர்பொலிமெரிசைகள், வெவபட்டி ஒளி வெளியேற்றத்தகைமை மற்றும் தகை வெவ உறுதியான ஆகியவற்றை கொண்ட கரிம பொருட்களை உதவக்கூடவதில் கைவமான முயற்சி கைவம் செயல்திறமடையு. எலக்ட்ரான் சமீகரி கட்டமைப்பு ஆண்கு இடைநடு சமமான வலுவியல் கொண்டிருக்கிறது: (1) - எலக்ட்ரான் (புரான்ஸ் - எலிமின) மற்றும் (2) - எலக்ட்ரான் (கிஸ் - எலிமின), (3) எலக்ட்ரான் 125 டிசீரி செயலியல் உதவதகைமைகை கொண்டிருக்கிறது. அதே சமயம் (2) எலக்ட்ரானின் உதவதகைமைகை π-π ஆகும். டிரான்ஸ் பகுதிகை உயர் ஆற்றல் தகைமைகை எ தகைமையில் :புரான்ஸ்-கென்ஸ் ஆகி தகைமையில்படுகிறது. ஒளி வேதியல் கொண்ட, எலக்ட்ரானின் இந்த டிரான்ஸ் சிஸ் ஒளி சமதகைமைகை, ஒரு தகைமையான ஒருபகுத்தகை தகை :புரான்ஸ்-கென்ஸ் பூப்பம் மூலம் கைவான்கூடபடலாம். குலெய்லிகை :பொட்டி-ஒத்த தகைமைகை செயல்பாட்டில் ஒரு தகைமையான கட்டி, சிஸ்-கிஸ் அல்லது டிரான்ஸ் உயர் ஆற்றல் தகைமையில், ஒன்றுக்கொன்று தொடர்புடைய எலக்ட்ரான் தகைமையான திரித்த அமைத்தகைகள். சிஸ்-கிஸ் எலக்ட்ரான் வகைமுறை மூலக்கூறுகள் பொதுவாக வெவமையாகவும், வேதியியல் ரீதியாக தகைமையாக இருக்கும். இதனால் உயர்சுதகை மற்றும் ஒளிதகை பண்புகூறுகள் ஆகியவை பொறுத்தகை ஒளி பூப்பம்கை கைவான்கை வகைமையாக இருக்கும். எரிவ இடைக்கூட சமய்க்கை, வெவவிய ஒளிவியல் ககைகை, மின்னணு தகைமையான்கைகை. பூ தகைமையான்கைகை மற்றும் பிற மின்சார விலகல் சாதகைகள் ஆகியவற்றில் கிஸ்-கிஸ் எலக்ட்ரான் எலக்ட்ரான்

பயன்படுத்தப்படுகின்றன. அவைகள் ஒளிப்படவியல், ஒளிச்சிதிர, உயிரியல் மற்றும் ஒளிவெளி ஆய்வில் பரவலாக முக்கிய பங்கு வகிக்கின்றன. என்வென்சின் சிமென்டரிக் வடிவமைப்பு முறைகளுக்கான மின்னணு பண்புகள் மற்றும் அடிநிலை, உயர் நிலை ஆற்றல் மட்டங்களில் முறைகளுக்கான கட்டமைப்பு அடிப்படையில் பெரும் பங்கு வகிக்கிறது.

சுயகோ குழு கோண்ட சாயம், அதிக செயல்திறன் சாயங்களில் முக்கிய வகையாகவும், ஒவ்வொரு அமைவு எளிதான செயலாக்கப்படுகின்றன, வெளும் நல்ல இயந்திர பண்புகள், வெடய மற்றும் வெடய-ஆக்சிஜனேற்ற நிலைத்தன்மையைக் காட்டுகின்றன. இந்த கட்டுமானத்தில் உலோகமற்ற 000, (2) 3- (4- (4-மெத்தோசைசைண்டரீசன்) பிளாஸ்டிக் 2-சுலோனோராசிக் அமில சாயம் பகுப்பாய்வு செயல்படுத்தப்படுகிறது.

2. கணக்கீட்டு முறைகள்

கணக்கீட்டு முறைகளில் நடைமுறைப்படுத்தப்படும் அடுத்த செயல்பாட்டு முறைகள் கோண்ட கோண்டிசனஸ் (7) கோண்டிசனஸ் மூலம் அமைந்து கணக்கீட்டு ஆய்வுகள் நடத்தப்பட்டன. (2) 3- (4- (4-மெத்தோசைசைண்டரீசன்) பிளாஸ்டிக் 2-சுலோனோராசிக் அமிலத்தின் அடுத்தியான செயல்பாட்டுக் கோண்டிசனஸ் (DFT) 8-11) இந்த நேரத்தில், B3LYP/DZVPD அணுகுமுறையில், லீ-யாங்-யாங் (12) ஆல் மூலிய அமைவு

B3LYP / 6-311 ++G (d, p) மற்றும் HF / 6-311 ++G (d, p) இயல் பயன்படுத்தி (2) 3- (4- (4-மெத்தோசைசைண்டரீசன்) பிளாஸ்டிக் வடிவத்தை முறைகளுக்கான வடிவியல் அமைப்பு 2-சுலோனோராசிக் அமிலத்தின் உயர்ந்த நிலையில் இருந்தது. (2) 3- (4- (4-மெத்தோசைசைண்டரீசன்) பிளாஸ்டிக் 2-சுலோனோராசிக் அமிலம் உயர்ந்த முறைகளுக்கான வடிவியல் அமைப்பு படம் 1 இல் காட்டப்பட்டது. பிளாஸ்டிக் நீளங்கள் பிளாஸ்டிக் கோண்டிசனஸ் மற்றும் இருமுறை பிளாஸ்டிக் கோண்டிசனஸ் அட்டவணை 1 (அ), 1 (ஆ) மற்றும் 1 (இ) ஆகியவற்றில் பட்டியலிடப்பட்டுள்ளன. இந்த கணக்கீட்டின் பங்கு அமைப்பு உயர்ந்த வடிவியலையே பயன்படுத்தி பிளாஸ்டிக்

கோண்டிசனஸ் செயல்பாட்டுகளுக்கான பெரி (11) பயன்பாடு கலப்பின செயல்பாட்டை உள்ளடக்கி 6-311++G(d, p) (13) அடிப்படையாக கோண்டிசனஸ் செயல்பாட்டை. இறுதி செயல்பாடுகள் இந்த செயல்பாட்டு மற்றும் 6-311++G (d, p) அடிப்படையிலான முறைகளை பயன்படுத்தி பெறப்பட்டன. இது அதிக நம்பகமான செங்குத்து ஆற்றல்களைப் பெற வேண்டி உயர்நிலை செயல்பாடுகளை உள்ளடக்கியது (14).

புற அந்த உயர்நிலை நிற மூலம் ஆற்றல்கள் பெறவந்தது நாம் நேரம் சந்திர செயல்பாட்டு கோண்டிசனஸ் கோண்டிசனஸ் சமன்பாடுகள் (DFT) தீர்மானத்தின் மூலம் ஆற்றல் மட்ட கணக்கீட்டை செயல்படுத்தியுள்ளோம். முன்னவாக தெரிந்த மாற்றி (PCM) [15-17] கோண்டிசனஸ் 2) 3- (4- (4-மெத்தோசைசைண்டரீசன்) பிளாஸ்டிக் 2-சுலோனோராசிக் அமில பண்புகளை கரைப்பான்கள் விளைவுகளை மதிப்பீடு செய்ய பயன்படுத்தப்பட்டுள்ளது. இந்த மாற்றியில், கரைப்பான்கள் ஒவ்வொரு கரைபு அணுவும் சிறிய கோண்டிசனஸ் கோண்டிசனஸ் ஒரு கட்டமைப்பை குறிக்கும் பொதுவாக குறிக்கப்படுகிறது. கோண்டிசனஸ் அதன் மின்சுத்தா மாற்றில் மற்றும் நிற அமைவுகளை வகைப்படுத்தப்படுகிறது. அமைந்து PCM கணக்கீடுகளிலும், அட்டவணைகளை கரைப்பான்கள் எடுத்து கோண்டிசனஸ் பிளாஸ்டிக்.

3. முடிவுகள் மற்றும் விவாதம்
3.1 வடிவியல் அமைப்பு

நீளங்கள், பிளாஸ்டிக் கோண்டிசனஸ் மற்றும் இருமுறை பிளாஸ்டிக் கோண்டிசனஸ் கோண்டிசனஸில் கணக்கீட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 1. (2) 3- (4- (4-மெத்தோசைசைண்டரீசன்) பிளாஸ்டிக் உயர்ந்த முறைகளுக்கான வடிவியல் அமைப்பு 2-சுலோனோராசிக் அமிலம்.

**அட்டவணை 1 (இ). இருமுடிப் பிணையு
கோணங்கள் கூசிரி (2E) & 4-4-
மெத்தோக்சைஸ்டிரீன்) பிணையல்; &
சுப்கோனோரீலிக் அமிலத்தின் பிணையு
கோணங்கள் கூசிரி)**

அணுகிகள்	DFT	HF
C9-C1-C9-C9	-178.8882	-178.7582
C9-C1-C9+H9	0.8889	1.8889
H22-C1-C9-C9	0.8899	2.2922
H22-C1-C9+H23	-178.8833	-178.0892
C2-C1-C9-C10	0.8487	18.2888
C2-C1-C9-C14	-178.8821	-182.1911
H22-C1-C9-C10	-178.8881	-183.8873
H22-C1-C9-C14	0.8402	15.2818
C1-C2-C9-C4	0.8408	14.1988
C1-C2-C9-C8	-178.8883	-188.0846
H23-C2-C9-C4	-178.888	-187.3886
H23-C2-C9-C8	0.8331	12.3188
C2-C3-C4-C5	-178.8877	-178.4885
C2-C3-C4+H4	0.8859	1.4488
C9-C3-C4-C5	0.8832	0.8207
C9-C3-C4+H4	-178.8835	-178.2879
C2-C3-C9-C7	178.9872	179.4245
C2-C3-C9+H27	-0.0012	-8.2202
C4-C3-C9-C7	-0.0087	-8.8304
C4-C3-C9+H27	178.986	179.8848
C3-C4-C5-C8	-0.0088	-8.2814
C9-C4-C5+H25	-178.8881	-178.7821
H24-C4-C5-C8	178.9881	178.3888
H24-C4-C5+H25	-0.0084	-8.8806
C4-C5-C9-C7	-0.0018	-8.2852
C4-C5-C9+H4	178.9889	-178.9467
H25-C5-C9-C7	178.9889	179.2888
H25-C5-C9+H4	-0.0015	-8.4845
C5-C6-C7-C8	0.8811	0.2886
C5-C6-C7+H28	-178.8884	-178.878
C84-C6-C7-C8	178.9884	179.3884
C84-C6-C7+H28	-0.0081	-8.8573
C5-C6-C94-C85	-178.8818	179.9474
C9-C7-C9-C9	0.8818	0.3188
C9-C7-C9+H27	188	179.9888

3.2. உயர்ந்த மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் (HOMO) மற்றும் மிகக் குறைவான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள்

எண்மையு மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்களின் (FMO) படிவல் முறை: அடிகை ஆற்றல் மட்டத்தில், பூமிநா வடிவமைக்கப்பட்ட உணர்வுநிலையின் மிக உயர்ந்த மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் (HOMO) மற்றும் மிகக் குறைந்த அளவிலான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால்கள் (LUMO) அடிகை ஆற்றல் அட்டவணை 2 இல் காட்டப்பட்டுள்ளன. (2E)-4-(4-மெத்தோக்சைஸ்டிரீன்) பிணையல்; & சுப்கோனோரீலிக் அமிலத்தின் HOMO-LUMO இடைவெளி 1.85 eV ஆகும். நிரொபுள்ள அமைப்புகளில், T_{10} கூட்டமைப்பை பயன்படுத்துகிறோம், ஏனெனில் இது 0.800 கல்க்கான சிறந்த குறைக்கத்தியாகக் செயல்படுகிறது. 188 எனவே 0.800 களின் பரிபுகளை பூமிநாசெவதற்கு இதனை ஒரு மாற்றியாக நாம் பயன்படுத்தி இருக்கிறோம். நான்கு புக மாற்றியாக தேர்ந்தெடுக்கப்பட்ட தனித்த T_{10} கூட்டமைப்பின் கணக்கிடப்பட்ட உயர்ந்த மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் மற்றும் மிகக் குறைவான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் ஆற்றல்கள் முறையே -3.55 மற்றும் -2.77 eV ஆகும். மேலும் குறைக்கத்தியின் உயர்ந்த மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் மற்றும் மிகக் குறைவான மூலக்கூறு ஆர்பிட்டால் இடைவெளி 3.78 eV ஆகும், TD-DFT கணக்கிடுகளின் அடிப்படையில் குறைந்தபட்ச மாற்றம் 3.28 eV ஆகும். சாயத்தின் நிலை அடிகை எடுக்கப்படும். படம் 2 இல் காட்டப்பட்டது சாயத்தின் HOMO (-4.67 eV), LUMO (-2.72 eV), மற்றும் HOMO - LUMO இடைவெளி 1.95eV ஆக கணக்கிடப்பட்டுள்ளது. சாயத்தின் ஆற்றல் T_{10} இன் HOMO ஆற்றலை விட குறைவு. இது T_{10} கணக்கிடுகு மற்றும் (2E)-4-(4-மெத்தோக்சைஸ்டிரீன்) பிணையல்; & சுப்கோனோரீலிக் அமிலத்திற்கும் இடையே உள்ள இடைமுக எலக்ட்ரான் பரிமாற்றம் 188 மூலம் இருக்கிறது.

**அட்டவணை 2. (2E) & 4-4-
மெத்தோக்சைஸ்டிரீன்) பிணையல்; &
சுப்கோனோரீலிக் அமில சாயத்தின் அனைத்து
மூலக்கூறு அளவிலான செயல்பாடு**

பண்புகள்	அளவுகள் (eV)
மிக உயர் மூலக்கூறு ஆர்்பிட்டாள்	5.66
மிக குறை மூலக்கூறு ஆர்்பிட்டாள்	2.72
ஆய்றவிமூட்ட இடைவெளி	2.94
கொட்டிதன்மை (σ)	1.47
மிததுதன்மை (δ)	0.34
அயனியாக்கும் திறன் (IP)	-5.66
எலக்ட்ரான் கவரும் திறன் (EA)	-2.72

3.3. ஒளியியல் பண்புகள்

சம அமைப்பு ஒளியியல் பண்புகளையும். ஒளியின் மாற்ற திறனையும் பெரிதும் பாதிக்கிறது. இது மெழும் மூலக்கூறு கட்டமைப்பின் தனித்தன்மையான தன்மையை எவ்வாறு பாதிக்கிறது என்பதை குறிக்கிறது. இந்த கட்டமைப்பு வேறுபாடுகள் பல்வேறு மூலக்கூறுகள் (H₂O, D₂O, CO₂, போன்ற அரைக்கலத்திகள், முதுவியை எடுப்ப பண்புகள் எதிர்மொன்று நம்பகத்திற்குப் பற்றிய மதிப்பீடுகளை தகவல்களை வழங்குகிறது. மூலக்கூறு அமைப்பு பகுப்பாய்வு ஆய்வுகூடத்தில், நாம் ஒரு சமத்தின் ஒளியியல் குணவியல்புகளைப் பற்றிய கருத்துகளை உருவாக்க முடியும். மெழும் இடைவெளி மூலக்கூறின் முதுவியைப் பற்றி = எலக்ட்ரான்களைப் பரவலாக்கக்கூடிய மூலக்கூறுகளில் ஒளியியல் பண்புகளின் அலைவரிசையை உருவாக்குகிறது.

n	HOMO	LUMO	n
1			1
2			1+1
3			1+2
4			1+3

படம் 2. அகத்தி எடுக்கப்படும் சம (2E) + 4- (4-மெத்தீனாமின்) மீகாற்றம் + 2-2-சுலோனோபாதிதி அமைப்பு.

அட்டவணை 3. சாயலின் (2) & (4) H-மெத்தோக்சைல்களின்) பிண்புறல்) & சீரமைப்புகளின் அளவுகோல் குறியீடுகள் அளவுகோல்

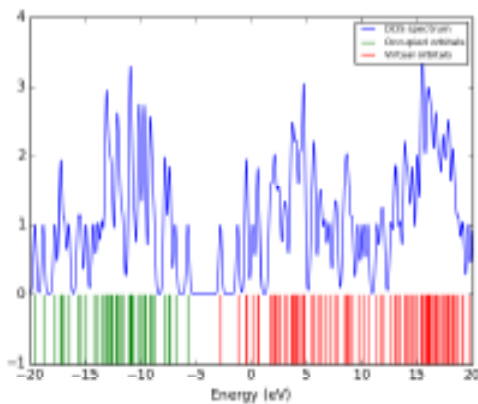
ச	ச ₁	ச ₂	ச ₃	ச ₄	ச ₅
DFT6-31G	-114.81	-137.69	-137.84	1.32-10 ¹⁸	3.34-10 ¹⁸ ecm
HF6-31G	-124.87	-141.25	-138.17	2.00-10 ¹⁸	2.29-10 ¹⁸ ecm

அட்டவணை 4. சாயலின் (2) & (4) H-மெத்தோக்சைல்களின்) பிண்புறல்) & சீரமைப்புகளின் அளவுகோல் குறியீடுகள் அளவுகோல்

ச	ச ₁	ச ₂	ச ₃	ச ₄	ச ₅	ச ₆	ச ₇	ச ₈	ச ₉	ச ₁₀	ச ₁₁
DFT6-31G	-284.41	-173.82	-114.84	-29.87	0.20	-0.01	18.80	-1.88	0.01	3.578-10 ¹⁸ ecm	
HF6-31G	-205.40	-172.81	-117.85	-29.78	64.92	-2.17	8.78	-3.14	3.42	3.269-10 ¹⁸ ecm	

ஒளி பிடிக்கத் தோல்வியு குறியீடுகள் தனித்தனியே அளவிடும் குடி விதிப்புகளாக உள்ளது எனவே ஒரு நிலை கட்டிடக்கலைப் போன்ற முக்கியத்துவம் இல்லாத சிறந்த குறியீடுகள் பரிசு போன்ற அளவுகோல் குறியீடுகள் மாற்றியமைவு வழிவகுக்கிறது. இது அளவு முன்னவகு தனிமை போன்ற சிறந்த குறியீடுகள் மாற்றியமைவு உள்ளது (2) மேலும், ஒரு சம உணர்ச்சி திறப்புக்கான முக்கிய பகுதிகளை வகைப்படுத்தப்படுகிறது: இதுமுன் மற்றும் முன்னவகுதனிமை (2), D-A இணைப்புகளின் சமய ஒரு அளவு அளவு தடுவற்களையாகக் கொள்ளப்படுகிறது. இந்த வகையான முக்கியத்துவம் உள்ளது, உள் முக்கியத்துவம் பரிமாற்றத்தை. ஒளி பிடிக்காமல் ஸ்டீரன் - பரம்பல் உள்ள வடிவான துவருமுன்னப்பின் வகைப்படுத்தும். இத்தகைய அளவுகோல் கணிசமான ஒளியின் மாற்று விதிவிலக்கு, ஒளிவகுதலில் விசையு மற்றும் குறியீடுகள் ஒளியின் விசையு ஆகியவற்றைக் காட்டுகிறது (2). இவை மட்டுமல்லாமல் பிடிக்கப்படும் பிடிக்கப்படும் ஒளியின் போன்ற உற்பத்தியையும் பிடிக்கப்படும் மாற்றும் இத்தகைய உயர் நிலை

ஆற்றலில் உள்ள முக்கியத்துவம் முன்னவகுதனிமை தோல்வியு குறியீடு காரண அதன் ஆற்றல் திறம் பகுதி மற்றும் உயர் ஆற்றல் திறமைகள் இதுமுன்னவகு இடம்பெறும் ஒரு பெரிய வேறுபாட்டில் கொள்ளப்படுகிறது ஒரு முக்கியத்துவம் குறுவகுதனிமை. ஒரு சமச்சீர்த அளவு தோல்வியு குறியீடு. இது ஒரு பகுதிக்கு வடிவான வாய்ப்புகளையும் மறுபகுதிக்கு வடிவான உற்பத்தியையும் இதுக்கான இடங்களை பிடிக்கப்படும் இடங்களை இடங்களை ஒரு பரம்பல் முக்கியத்துவம் இடங்களைப்படுத்தும். இத்தகைய அளவு அளவீடுகள் இடங்களை ஒத்திசையு விசையு அளவிடும். இது குறியீடுகள் ஒளியின் வேறுபாட்டையும், ஒளி பிடிக்காமல் உற்பத்தி பிடிக்கப்படும் இடங்களைப்படுத்தும்.



படம் 3. (2E) -3- (4) (4-மெத்தோக்சிஸ்டைரில்) பிளஹல் -2 -2-சனோனோராரிலிக் அமிலத்தின் மிகைணு உறிஞ்சுதல் நிறமலை.

உள் மூலக்கூறு உயர்நிலை ஆற்றல், மூலக்கூறுகளுக்கிடையேயான மிகைணு மற்றும் ஆகிபவற்றை நிர்ணயப்பதில் இருமுனைவாக்கம் மற்றும் துருவ முனைப்பு பண்புகள் முக்கிய பங்கு வகிக்கின்றன. இ-2E, மேலே கூறப்பட்ட ஆய்வுகளை ஆராய்வதற்காக நாம் B3LYP / 6-311 ++G (d, p) பயன்படுத்தப்பட்டது. இந்த சமத்திறனை, ஒளி மின்னொட்ட உறிஞ்சுதல் மூலக்கூறு கட்டமைப்பு மற்றும் அல்லாத தேதியல்சாரா ஒளிப்பில் ஆகிபவற்றிற்கு இடையேயான நிலைப்பினை நாம் தெளிவுபடுத்த முடியும். ஐசோடொபிக் துருவமுனைப்பிற்கான தொடர்பு [21, 29] பின்வருமாறு உள்ளது:

துருவ முனைவாகுதன்மை -ஐசோடொபி மாறிலி

$$\alpha = \frac{1}{3}(\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z) \quad (1)$$

துருவமுனைப்புத்தன்மை அனிடொஸ்ரோபிசி மாறிலி

$$A_{\text{an}} = \left[\frac{(\alpha_x - \alpha_y) + (\alpha_y - \alpha_z) + (\alpha_z - \alpha_x)}{2} \right]^2 \quad (2)$$

சராசரியாக உயர் முனைவாக்குத்தன்மை

$$A_s = \left[(\beta_x + \alpha_x + A_{\text{an}})^2 + (\beta_y + \alpha_y + A_{\text{an}})^2 + (\beta_z + \alpha_z + A_{\text{an}})^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

● கூடுதல்

$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \beta_x, \beta_y, \beta_z, \gamma_x, \gamma_y, \gamma_z, \delta_x, \delta_y, \delta_z, \epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z$
ஆகிபவை முனைவாகுதன்மை மற்றும் உயர் முனைவாக்குத்தன்மையில் தனித்தை கூறுகள்.

அட்டவணைகள் 3 மற்றும் 4 ஆகியவை (2E) -3- (4) (4-மெத்தோக்சிஸ்டைரில்) பிளஹல்) -2-சனோனோராரிலிக் அமிலத்தின் துருவ முனைவாகுதன்மை மற்றும் துருவ உயர் முனைவாகுதன்மை மதிப்புகளை பட்டியலிடுகிறது. ஐசோடொபிக் துருவமுனைப்பின் தனிப்பட்ட தனித்தை கூறுகளுடன் கூடுதலாக, துருவமுனைப்பு அசைடேபியோ மாறிலி மற்றும் ஹைபர்போலிரிசிபிட்டி ஆகியன கணக்கிடப்பட்டுள்ளன. (2E) -3- (4) (4-மெத்தோக்சிஸ்டைரீரல்) பிளஹல்) -2-சனோனோராரிலிக் அமிலம் 129.84 a.u (1.92x10⁻²³esu) மற்றும் 414.22 a.u (3.57x10⁻³⁰esu) ஆகிய கணக்கிடப்பட்ட மதிப்புகளை கொண்டுள்ளன.

3.4 UV புலப்படும் பகுதி

தலைப்பு கலவை மின்னணுளை தீர்மானிக்கும் பொருட்டு, கணக்கீடுகள் மூன்று கட்ட உயர்நிலைகளை TD-DFT / B3LYP / 6-311 ++G (d, p) பயன்படுத்தி வாயு மற்றும் கரைப்பான் நிலையில் மேற்கொள்ளப்பட்டன. புலப்படும் பகுதியில் உள்ள உறிஞ்சுதல் (2E) -3- (4) (4-மெத்தோக்சிஸ்டிரீரல்) பிளஹல் -2 -2-சனோனோராரிலிக் அமிலத்திற்கு UV பகுதியில் உட்செலுத்தப்படுவதைக் காணலாம். நேரம் சார்ந்த - அடர்த்தி செயல்பாட்டு கோட்பாட்டின் முடிவுகள் வெற்றிடத்திலும் கரைப்பானிலும் முக்கிய மாற்றத்தைக் கொண்டுள்ளன. நேரம் சார்ந்த - அடர்த்தி செயல்பாட்டு கோட்பாடு கணக்கீடுகளில் வெற்றிட மற்றும் கரைப்பான் விளைவுகளுக்கு இடையில் உள்ள அட்டவணை 5. சாயத்தின் (2E) -3- (4) (4-மெத்தோக்சிஸ்டெய்ரல்) பிளஹல்) -2-சனோனோராரிலிக் அமிலத்தின் உறிஞ்சுதல் அகல அலைவரிசை (Abs), ஆஸிலேட்டர் வலிமை (a.u இல் F), சுற்றுப்பாதை மாற்றங்கள் மற்றும் ஒளி அறுவடை செயல்திறன் (LHE) வேறுபாடு இரண்டு தனிச் சிறப்பிலிருந்து உருவாகலாம். முதல் அம்சம் சிறிய உயர் ஆற்றலை தூண்டுகிறது, இது சிறிய இடைவெளி. மற்றது கரைப்பான் விளைவுகளாகும்.

	2.7695	449.14	0.4310	0.628	K-L (80%)
செர்பியன்	6.8871	1397.86	0.0009	0.002	K-L+1 (700%)
	1.7147	723.06	0.0002	0.128	K-L (80%)
	2.7695	490.23	0.2315	0.864	K-L+L (53%)

3.5 ஒளி அறுவடை திறன்

பொதுவாக, DSSC களின் செயல்திறன் ஒளி உணர்விறக்கலகை சார்ந்துள்ளது. ஒளி உணர்விறக்கலகை உலகை சிக்கலான மற்றும் உலகை அல்லாத சிறிய உணர்விறக்கலகை வகைகளாக வகைப்படுத்தப்படுகின்றன. உலகை அல்லாத சாயங்களை அடிப்படையாகக் கொண்டவை வாய்க்க - F - ஒப்பிட்டு - F - கட்டமைப்பு உடையவை ஆகும். O-F-A கட்டமைப்பில் உண்மையான பொருத்தமான குழுக்களைத் தேர்ந்தெடுப்பதன் மூலம் இந்த வகை சாயங்களின் ஒளி உணர்விறக்கலகை பண்புகளை தெளிவாகக் கையாளலாம். எனவே TO-DFT இந்த ஆய்வில் பயன்படுத்தப்படுகிறது.

மற்ற உயர் மட்ட குவாண்டம் அணுகுமுறைகளுடன் ஒப்பிடுகையில் ஒளி உணர்விறக்கலகை திறன் பண்பு மற்றும் உயர் ஆற்றல் மட்ட பண்புகளையும் ஆய்வு செய்வதற்கான ஒரு பயனுள்ள வழிமுறையாகும். ரெனலின் கணக்கிடப்பட்ட ஆற்றல் மட்டங்கள் வழக்கமான மூலக்கூறு தத்துவார்த்த பகுப்பாய்வுகளுக்கும் வினக்கலகைகளுக்கும் ஏற்றது. இந்த பிரிவில், எலக்ட்ரான் சார்ந்த DSSC களின் எலக்ட்ரான் ஊசி திறனை செயல்படுத்துகின்ற கட்டமைப்பு மாற்றங்கள் குறித்து விவாதிக்கப்படுகின்றன. நிரலாக, அனைத்து மாற்றங்களும் தத்துவார்த்த தீர்மானத் திருத்தங்களாகவும், ஒரு புதிய குழுமத்தின் புதிய பகுப்பாய்வு செய்யப்படும் முடியும். சாயத்தின் ஒளி அறுவடை செயல்திறன் (LHE) ஒளிக்கதிர் எதிர்வினைகளை அடிப்படையில் முடித்ததாக இருக்க வேண்டும். LHE என்பதன் சமன்பாடு.

இங்கே F என்பது λ_{max} உடன் தொடர்புடைய உறிஞ்சுதல் (அலையியற்றி வலிமை) ஒளி அறுவடை செயல்திறன் (LHE) என்பது DSSC இன் செயல்திறனை கட்டிக்காட்டும் ஒளிக்கு பிரதிபலிக்கும் சாயத்தின் செயல்திறன் ஆகும். அனைத்து கணக்கிடப்பட்ட ஒளி அறுவடை

செயல்திறன் மதிப்புகள் அட்டவணை 5 இல் சேகரிக்கப்பட்டுள்ளன. ஏற்பி மற்றும் வழங்கி அணுக்களின் மாற்றீடு டி.பீனி பண்புகளை மேம்படுத்துவதுடன், இச்சாயம் DSSC இல் பயன்படுத்தப்படலாம் என்றும் அது உறுதி செய்கிறது.

3.6 வெப்ப பண்புகள்

DFT / B3LYP / 6-311 ++ G (d, p) மற்றும் HF / 6-311 ++ G (d, p) அடிப்படையில் அட்டவணை 6 இல் வழங்கப்பட்டுள்ளது. பல வெப்பவியியல் அளவுருக்கள் கணக்கிடப்பட்டு DFT கணக்கீட்டில் பூஜ்ஜிய புள்ளி அதிர்வு சக்திகளை தீர்மானிக்கும் துல்லியமான கணிப்புக்கு தேவையான அளவு மாற்றிகள் எடுத்துக்கொள்ளப்பட்டுள்ளன. மூலக்கூறுகளின் மொத்த ஆற்றல் என்பது சுழற்சி, அதிர்வு மற்றும் மின்னணு ஆற்றலின் மொத்தமாகும். டி.எ.பி.டி (DFT / B3LYP) மூலம் பெறப்பட்ட ZPVE அளவு HF முறையை விட மிகவும் குறைவாக உள்ளது. (2E) -3 (4- (4-மெத்தோசில்பிரெய்ல்) பிளவுறல்) -2- சனோனோராரிலிக் அமிலத்தின் மிகப் பெரிய ZPVE மதிப்பு HF / 6-311 ++ G (d, p) இல் பெறப்பட்டது. 195.23 Kcal/mol DFT / B3LYP / 6-311 ++ G (d, p) இல் பெறப்பட்ட குறைவான 188.30 Kcal/mol ஆகும்.

DFT / B3LYP / 6-311 ++ G (d, p) மற்றும் HF / 6-311 ++ G (d, p) முறையுடன் மூலக்கூறின் இருமுனை கணம் கணக்கிடப்பட்டது. இருமுனைக் கணம் மூலக்கூறு மின்னுட்ட பரவலை பிரதிபலிக்கிறது இது மூன்று பரிமாணங்களில் ஒரு வேகமாக குறிக்கப்படுகிறது. எனவே, இது எதிர்மறை மற்றும் நேர்மறை மின்னுட்ட மையங்களில் சார்ந்துள்ள மூலக்கூறு முழுவதும் மின்னுட்ட இயக்கத்தை பிரதிநிதித்துவப்படுத்துவதற்கு வினக்கமளிக்கவும் பயன்படுத்தப்படலாம். B3LYP / DFT / 6-311 ++ G (d, p) மற்றும் HF / 6-311 ++ G (d, p) கணக்கீடுகள் HF / 6-311 ++ G க்கு மிக உயர்ந்த

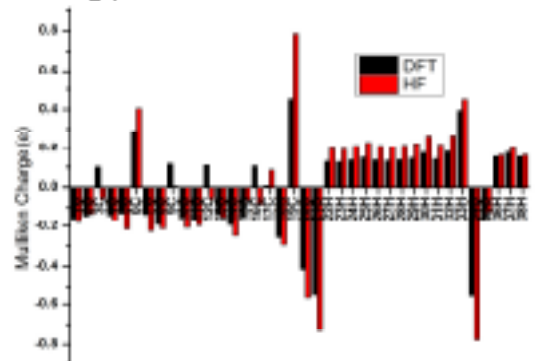
இருமுனைக் கணங்களும் (D, p) DFT / B3LYP / 6-311 ++ G (d, p) ஆனது குறைந்த இருமுனைக் கணங்களையும் அளிக்கிறது.

அட்டவணை 8. வெப்ப இயக்கவியல் பண்புகளுக்கான அளவுக்கோள்கள்

பண்பு	HF	DFT/B3LYP
எதிர்-புள்ளி ஆற்றல் ஆற்றல் ஆற்றல்	185.28	185.20
எழல் பாரிபீ (H ₂ O)	0.06948	0.0699
	0.06748	0.0672
	0.0082	0.0089
	0.0080	0.0028
எழல் வெப்பநிலை (கெல்வின்)	231.21	0.0027
	0.888	188.13
	0.888	0.889
வெந்த ஆற்றல் (கிராமோலிமென்)	201.40	0.889
வெந்த ஆற்றல் (கிராமோலிமென்)	74821	187.40
நேர்வெட்டு	16.24	8.8513
நேர்வெட்டு ஆற்றல் (கிராமோலிமென்)	548.32	15.14
எழல்-சி ஆற்றல் (கிராமோலிமென்)	521.46	527.34
எழல்-சி ஆற்றல் (கிராமோலிமென்)	1174.88	795.05
ஆற்றல் ஆற்றல் (கிராமோலிமென்)	1354.38	1880.46
இருமுனை திருப்பத்திறன்	1543.64	1235.76
	1321.08	1801.72
ஆற்றல் வெப்பநிலை (கெல்வின்)	2181.28	1228.00
		1816.06

3.7 முல்லைகள் அணுமின்னூட்டங்கள்

B3LYP 6-311 ++ G (d, p) மற்றும் HF / 6-311 ++ G (d, p) அளவுக்கோள்களின் மீற முல்லைகள் முறையில் மின்னூட்டங்கள் கண்காணப்பட்ட தலைப்பு சேர்மங்களின் அணுமண்புகள். படம் 4 இல் காட்டப்பட்டுள்ளபடி முல்லைகளின் மின்னூட்டங்கள் பரவி அமைந்துள்ளது. காப்பன் அணுக்கின் மின்னூட்டங்கள் நேர்மறை மற்றும் எதிர்மறையாக இருக்குமென கண்டறியப்பட்டது. இந்த சமயத்தில் மின்னூட்ட அளவானது -0.2403 மற்றும் 0.7329 ஆகும்.



படம் 4. (D) & (H) மெத்தோலிம்-காட்டிரில் மிகுதல்) & சகலவகையிலும் அமீல தீயின் முல்லைகள் மின்னூட்ட பரவல்.

எதிர் மின்னாற்றல் அணுவின் இணைத்திருப்பதன் காரணமாக, முல்லைகளில் C19 அணு அமிலமே எதிர் மின்னூட்டத்தை பெற்றுள்ளது. H மற்றும் O அணுவின் அளவு முறையே -0.2902 மற்றும் -0.7774 ஆக கண்காணப்பட்டது. ஒவ்வொரு அணுவின் நேர்மறை மின்னூட்டமாகும். காப்பன் மற்றும் ஒவ்வொரு அணுக்கின் இடைமேயான பரிமாற்றத்தைக் குறிப்பிடுகிறது.

3.8 மீற முல்லைகள் பண்புகள்

மரபணு செயல்பாட்டுக் கோட்பாட்டில் (DFT) HOMO-LUMO ஆற்றல் கிடைப்பு பெறுவதன் மூலம் தளம (7), மேலம (8) மற்றும் வெதி செயல்திறன் வகைப்படுத்தல்கள் குறிப்பாக ΔE_{H-L} செயல்பாடு E_{H-L} மற்றும் உடனடி மேலம E_{H-L} ஆகியவற்றை சார்ந்து கூலத்தளம கிடைப்பு வெந்த ஆற்றலின் இடைவெளி வகைப்படுத்திய ஆற்றலை சார்ந்து இது மேலும் தலைப்புத்தளம் மற்றும் செயல்திறன் கண்காண

கொண்ட (2E) \rightarrow (+) (+-)-செத்தோக்சிசெல்டிரைடு; பின்னர், α -செனோசெனாநிடுக அமிலம் லைட்டரான உட்படுத்தும் செயல்முறை மூலம் பீட்டா இலகுவான மிக மூலம் பரிமாற்ற செயல்திறம், α , β அளவுகூட்டிக்கு அளித்து வழங்கியாக செயல்படுகிறது. (2E) \rightarrow (+) (+-)-செத்தோக்சிசெல்டிரைடு; பின்னர் α -செனோசெனாநிடுக அமிலத்தின், HOMO மற்றும் LUMO இலகுவான மிக குறைவானது இக்குறைவானது மற்றும் மூல அளவுகூட்டிகள், நிறமாலா, மிகளையு கட்டமைப்புகள் மற்றும் எடுப்புகள் பண்புகள் ஆகியவற்றின் பகுப்பாய்வுகள் இவ்வந்து வகுக்கிறது. காரண ஒளிபிடுகொட்டி மற்றும் பகுப்பாய்வு திறம் மிகுந்த அளவில் உள்ளது.

ஒப்புகை: இந்த ஆராய்ச்சியை நிறைவேற்றுவதற்கான பெரியப் பங்களிப்புக்கு, கோர் ஒளிபிடுக மற்றும் செனார் கோர் ஆய்வக ஆராய்ச்சி அறிஞர்கள் மதிப்பிற்கு ஆகோசான கூறி வழங்கின உற்சாகத்தை வழங்கியதற்கான ஆய்வகம் கார்பல் நன்றிகள் உட.

மேற்கோள்கள்

- [1]. H. O. Hoogen, and M. Gratzel Nature 353 (1991) 737,
- [2]. M. K. Nazeeruddin, A. Kay, I. Rodicio, R. Humphrey-Baker, E. Muller, P. Liua, N. Vlachopoulos and M. Gratzel; J. Am. Chem. Soc, 115 (1993) 6382,
- [3]. Z. S. Wang, F. Y. Li, C.H. Huang, L. Wang, M. Wei, L. P. Jia and N.Q. Li; J. Phys. Chem. B 104 (2000) 9676,
- [4]. K. Hou, B. Z. Tian, F. Y. Li, Z.Q. Bian, D. Y. Zhao and C.H. Huang; J. Mater. Chem. 15 (2005) 2414,
- [5]. I. Kertini, D. Mendes, D. Blahn, J. C. D. da Costa, P. Menezes, J. D. Richea and G. Q. Lu; J. Mater. Chem. 14 (2004) 2917,
- [6]. D. Gokuyasu, C. J. Brauer, N. S. Sirciñici, D. Veangsuangda, R. Kibocoma, D. Vandenande, F. Kinsberger, and H. Schindler; Synth. Met. 125 (2002) 279,
- [7]. J. Hirsch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, R. Nakajima, Y. Hada, O. Kliao, H. Nakai, T. Vreven, J.A. Montgomery Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.H. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramilla, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O.Yazyev, A.J. Austin, H. Cammi, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, Gaussian 0.3, Revision A.02, Gaussian Inc., Wallingford, CT., 2009.
- [8]. P. Hohenberg, and W. Kohn; Phys. Rev. B 136 (1964) 864,
- [9]. W. Kohn, and L. J. Sham; Phys. Rev. 140 (1965) 1133,
- [10]. R. G. Parr, and W. Yang; Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, Oxford, 1989,
- [11]. A.D. Becke; J. Chem. Phys. 104 (1993)5648,
- [12]. Lee, C. Yang, and R. G. Parr; Phys. Rev. B, 37 (1988) 785,
- [13]. P. C. Hariharan, and J. A. Pople; Mol.Phys. 27 (1974) 219,
- [14]. E. Lovern; Computational Chemistry-Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Kluwer Academic Publishers, 2003,
- [15]. M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, and V. Barone; J. Chem. Phys. 117 (2002) 43,
- [16]. H. Cammi, H. Monardi, and J. Tomasi; J.Phys. Chem. A 104 (2000) 5631,

- [17]. M. Cossi, and V. Barone: *J. Chem. Phys.* 115 (2001) 4708.
- [18]. M.K. Nazareddin, F. De Angelis, S. Fantuzzi, A. Saloni, G.Viscardi, P. Linka, S. Ita, H. Takara, M. Gratzel: *J Am Chem Soc* 127(2005)16835.
- [19]. D.F. Waisa, G.J. Meyer: *Annu Rev Phys Chem* 56 (2005) 119–156
- [20]. W. Zhang, Y.R. Shi, L.H. Gao, CH. Hong, HX. Luo, DG. Wu, NQ. Li: *J Phys Chem B* 103(1997) 675–681.
- [21]. O. Christensen, J. Gauss, JF. Stanton: *Chem Phys Lett* 305(1999) 147–155
- [22]. CW. Dirk, RJ. Twigg, G. Wagniere: *J Am Chem Soc* 108:5397
- [23]. P. Suppan: *J Mol Spectrosc* 30(1969) 17
- [24]. H. Hama, H.Kaibô, A. Waller: *J Chem Phys* 47(1967) 1183
- [25]. J. Kubitz, B.Chmielewski, J. Paszkowski: *Spectrochim Acta Part A* 63(2006) 524–531
- [26]. Y. Sun, X. Chen, L.Sun, X. Guo, W. Lu: *Chem Phys Lett* 381(2003) 397–403
- [27]. M.G. Parr, R.G. Pearson, Absolute hardness: comparison parameter to absolute electronegativity, *J. Am. Chem. Soc.* 105 (26) (1983) 7512-7516.
- [28]. P. Geerlings, F Van De Pelt, W. Langenaeker, Conceptual density functional theory, *Chem. Rev.* 103 (5) (2003) 1793-1873.
- [29]. Frisch JBFa8, *Expanding Chemistry with Electronic Structure Methods*, second ed., Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, 1994, 1996.
- [30]. P. Szent, Chemical hardness of atoms and molecules from frontier orbitals, *Chem. Phys. Lett.* 275 (5-6) (1997) 527-532.
- [31]. M.G. Pearson, *Chemical Hardness: applications from Molecules to Solids*, Wiley-VCH, Weinheim, 1997.
- [32]. M.G. Parr, Z. Zhou, Absolute hardness: unifying concept for identifying shells and subshells in nuclei, atoms, molecules, and metallic clusters, *Acc. Chem. Res.* 26 (5) (1993) 256-258.
- [33]. P. Hohenberg, W. Kohn, Inhomogeneous electron gas, *Phys. Rev.* 136 (5B) (1964) B864-B871.
- [34]. K.Y. Wong, A.G. Mercader, L.M. Saavedra, B. Homayouni, G.P. Romanelli, P.R. Duchowicz, QSAR analysis on tumor-related acetylcholinesterase inhibitors, *J. Biomed. Sci.* 21 (84) (2014) 1-8.
- [35]. P. Uthayakumar, T.V. Rajendrakumar, & Ganesanmurugan, Theoretical approach to the neuronal inhibition efficiency of some pyridazine derivatives using DFT method, *J. Comput. Methods Mol. Des.* 2 (1) (2012) 1-15.
- [36]. M.G. Pearson, Absolute electronegativity and hardness: application to inorganic chemistry, *Inorg. Chem.* 27 (4) (1988) 734-740.
- [37]. M.G. Pearson, Recent advances in the concept of hard and soft acids and bases, *J. Chem. Educ.* 64 (7) (1987) 561.

அறிவியல் கலைச்சொற்கள்

பொ. ஜெகதீஸ்வரன், வி. நடராசன்

ராஜலக்ஷ்மி தொழில்நுட்பக் கல்லூரி

aperiodic motion	காலச்சீரற்றஇயக்கம்
aperture	துளை
apex	உச்சி, சிகரம், முகடு
aphelion	(ஞாயிற்றின்) சேய்மைநிலை
apiezon oil	அப்பிசன்எண்ணெய்
aplanatic point	காட்டமிலாப்புள்ளி, பிறழ்ச்சியிலாப்புள்ளி
aplanatic surface	காட்டமிலாப்புறப்பரப்பு,
apogee	சேய்மைநிலை
apparent	தோற்றநிலை
apparent depth	தோற்றஆழம்
apparent loss	தோற்றஇழப்பு
appleton layer	ஆப்பிள்டன் அடுக்கு
applied physics	பயன்முறைஇயற்பியல்
applied research	பயன்முறைஆய்வு
applied science	பயன்முறைவிஞ்ஞானம்,
appreciative cristicism	பாராட்டுமுறைத்திறனாய்வு
aqueous tension	ஈர ஆவியழுக்கம்
aqueous vapour	ஈர ஆவி (நீராவி)
arc	வில்
arc lamp	வில்விளக்கு
arc spectrum	வில்நிறமாலை, மின்வில்நிறமாலை
archimedes spiral	ஆர்க்கிமெடீஸ்குருள்
area light	தளவிளக்கு

INDIAN SCIENCE AND TECHNOLOGY ASSOCIATION



Elavenil
(Regd.110/2015)

163/69, Secretariat colony, Kilpauk, Chennai-600 010, India
Email: elavenil.org@gmail.com, istaindia18@gmail.com
Mobile: 08939316518



Application Number		Membership Number		Admission date	
--------------------	--	-------------------	--	----------------	--

Membership Application

Name -----Sex-----

Designation -----

Institution -----

Date of Birth ----- Age----- Qualification-----

Mailing Address-----

----- District -----

State _____ Country _____ Pincode _____

Mobile No -----Email -----

Type of Membership

Life time (2000) ----- Annual (500) ----- Student (200) -----

Date

Signature

Printed and Published by **M.Srinivasan** on behalf of **ELAVENIL ORGANIZATION** and printed at **J.M. Process**, No.29, V.N.Doss Road, Border Thottam, Mount Road, Chennai-600 002 and published at 163/69, Secretariat Colony, 8th Street, Kilpauk, Chennai-10. Editor : **M. SRINIVASAN**