

தலையாங்கம்

- அறிவியல் தொழில்நுட்ப வளர்ச்சியில் மொழியின் முக்கியத்துவம்..... 5
முனைவர் பா.ஆனந்தன்

சிறப்புக் கட்டுரை

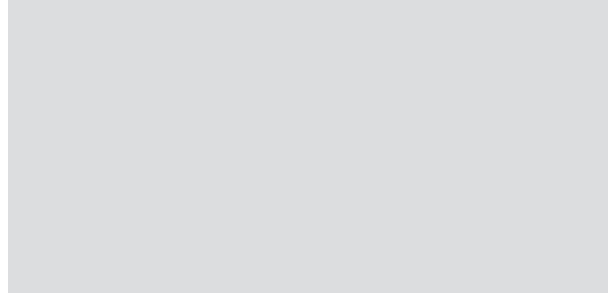
- கணபதி தனிகைமோனி 7
செந்தில்குமார் சந்திரன், க.அஜய் ஜவகர், பெ.இராமசாமி

ஆய்வுக் கட்டுரைகள்

- தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகக் குறிப்பும் பொருள் (BND) பற்றிய ஓர் அறிமுகம்.....10
முனைவர் நா.விஜயன், தா.கீர்த்திவாசன், ரவீந்தர்குமார், நக்மாஃகான், முனைவர் ஆர்.பி. பந்த்
- சுழல் சங்கரநாராயணன் - இராமசாமி (RSR) நுட்பம் என்ற புதிய படிக்க வளர்த்தல் முறையை பயன்படுத்தி நேர்சார்பிலா ஒளியியல் பயன்பாட்டிற்காக 2-அமினோபிரிமிடியம் 4-நைட்ரோபீனாலேட் 4-நைட்ரோபீனால் (2ஏபி4என்) படிக்க வளர்த்தல்.....14
பி.கருப்பசாமி, த.கமலேஷ், முத்துசெந்தில்பாண்டியன், பெ.இராமசாமி, சனில்வர்மா
- காஃபினை பிரித்தெடுத்து அதன் மூலக்கூறு அமைப்பு மற்றும் நிறமாகை பண்புகளை அடர்த்தி செயல்பாட்டு முறைகளின் மூலம் விளக்குதல்..... 22
பா.ராஜகுமார், ச.செல்வராஜ், கே.தீருநாவுக்கரசு, ந.சாரதாதேவி, சே.குணசேகரன், சு.குமரேசன்
- குவானியம் டிரைகுளோரோ அசிடேட் தனி படிக்கத்தின் வளர்ச்சி பண்பாக்கம் மற்றும் குவாண்டம் வேதி கணக்கீடுகள் 43
ரா.ஸ்ரீதேவி, ப.விவேக், தா.பாலு, ப.முருகக்கூத்தன், தா.ரா.ராஜசேகரன்
- குவானியம் 4-ஹைட்ராக்ஸி பென்சோயேட் மோனோ ஹைட்ரேட் படிக்க வளர்ச்சி மற்றும் பண்பாய்வுகள்..... 53
சு. நந்தினி, ப.முருகக்கூத்தன்
- இயற்பியல் வேதியியல் பண்புகள் கொண்ட நேரியல்சாரா ஒளியியல் ஒற்றை படிக்கம் : எத்தீலீன்-டை-அமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட்..... 57
கொ. சுதாகர், ப.முருகக்கூத்தன்
- நேருறா ஒளியிழைகளில் சாலிட்டான்கள் 62
முனைவர் ப.சண்முகசுந்தரம்
- Ce கலப்பிடப்பட்ட ZnO நானோ தகடுகளின் ஒளி வினையூக்கம் மற்றும் பாக்கீரியா எதிர்ப்பு செயல்பாடுகள்..... 66
ஜி. பூங்கொடி, ஆர். ராஜேஸ்வரி

பொதுக் கட்டுரை

- அறிவியல் கலைச்சொற்கள் 73
பொ. ஜெகதீஸ்வரன், வி. நடராஜன்

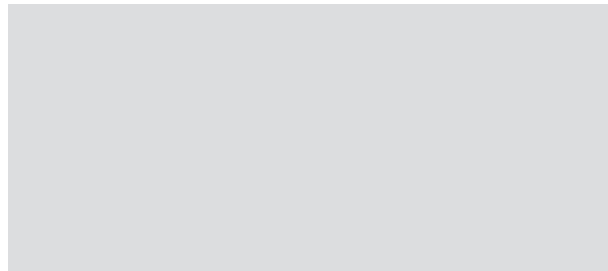


பிறநாட்டு நல்லறிஞர் சாத்திரங்கள்
தமிழ்மொழியிற் பெயர்த்தல் வேண்டும்
இறவாத புகழுடைய புதுநூல்கள்
தமிழ்மொழியில் இயற்றல் வேண்டும்
மறைவாக நமக்குள்ளே பழங் கதைகள்
சொல்வதிலோர் மகிமை இல்லை
திறமான புலமையெனில் வெளி நாட்டோர்
அதைவணக்கஞ் செய்தல் வேண்டும்.

– மகாகவி பாரதியார்

அணுவைப் பிளந்து ஏழ்கடலைப் புகுத்தி
குறுகத் தரித்த குறள்.

– ஓளவையார்



அறிவியல் தொழில் நுட்ப வளர்ச்சியில் மொழியின் முக்கியத்துவம்

முனைவர். பா. ஆனந்தன்

உதவிப் பேராசிரியர், முதுகலை மற்றும் ஆய்வு இயற்பியல் துறை
திரு கொளஞ்சியப்பர் அரசு கலைக் கல்லூரி (நிலை I), விருத்தாசலம் - 606001

இன்று நம் இந்தியத் திருநாட்டில் நாம் நிலவுக்கும் செவ்வாய்க்கும் செயற்கைக் கோள்களை அனுப்பி ஆய்வு செய்துகொண்டிருப்பது, நம் நாட்டில் அறிவியல் தொழில் நுட்பம் மிக வேகமாக வளர்ந்து வருவதற்குச் சான்றாகும்.

மனித மனம் இயற்கையில் உண்டாகும் அனைத்து நிகழ்வுகளுக்கான காரணங்களையும் அவற்றில் பொதிந்துள்ள உண்மைகளையும் அறியும் ஆர்வம் கொண்டதாக அமைந்துள்ளது. இவ்வாறு இயற்கையிலுள்ள அனைத்துப் பொருட்களிலும் உண்டாகும் தன்னிச்சையான நிகழ்வுகளை உற்று நோக்கி அவற்றின்மூலம் மனிதன் தன் வாழ்வின் தேவைகளை எளிதான முறையில் நிவர்த்தி செய்ய முனைந்துகொண்டே இருக்கிறான். இயற்கையில் உள்ள பொருட்களின் அந்நிகழ்வுகளைக்கொண்டு அவற்றின் பண்புகளைக் கண்டறிந்து கருவிகளை உருவாக்கி பளுவான வேலைகளை இலகுவாக்கி வசதியாக வாழ முனைகின்றான். இந்த வழிமுறைகளே தொழில் நுட்பம் எனப்படுகிறது. இத் தொழில் நுட்பத்தின் பலன் ஒரு நாட்டின் கடை நிலைக் குடிமகன்வரை சென்றடைதலே அந்நாட்டின் வளர்ச்சியாகும்.

அறிவியல் என்பது உண்மையை அறிதல் என்ற பொருளுடைய சொல்லாகும். மேலும், இது உன்னிப்பாகக் கவனித்தல், பரிசோதனைகள் மற்றும் தருக்கப் பகுத்தறிவு ஆகியவற்றின் மூலம் பெறப்படுகின்ற முறையான அமைப்பான அறிவாகும். எனவே, அறிவியல் வளர பரிசோதனைகளும் நிகழ்வுகளை உற்று நோக்குதலும் மிக அவசியமாகும். நிகழ்வுகளின் பரிசோதனை முடிவுகளையும் அவற்றின் தருக்கப் பகுத்தறிவினையும் மற்ற அறிவியலாளர்களுடன் விவாதித்து அவற்றின் உண்மையை அப்பொருட்களின் பண்புகளாக உணர்தல் அல்லது அறிதல் மிக அவசியமானதாகும்.

இவ்வாறு விவாதிக்க மொழி ஓர் இன்றியமையாத காரணியாகின்றது. எந்த ஒரு மனிதனும் தன் தாய் மொழியில் விவாதங்களை எடுத்துரைக்கும் போது அல்லது கேட்கும்போது மட்டுமே முழுமையான மற்றும் உண்மையான கருத்துக்கள் பரிமாற்றம் செய்யமுடியும் என்பதில் ஐயமேதும் இருக்கமுடியாது. தொழில் நுட்பத்தில் அசுர வளர்ச்சி கண்டிருக்கும் ஐப்பான் இதற்கொரு சிறந்த எடுத்துக்காட்டாகும்.

இன்று தமிழகத்தைச் சேர்ந்த இளம் அறிவியல் அறிஞர் பலர் மேலை நாடுகளில் தத்தம் துறைகளில் மிகச் சிறப்பான ஆய்வுகளை மேற்கொண்டு வருகின்றனர். அவர்களெல்லாம் தமது ஆய்வின் முடிவுகளையும் அவற்றின் விவாதங்களையும் நமது தாய்மொழியான தமிழில் ஆய்வுக் கட்டுரைகளாகச் சமர்ப்பிக்க முன்வந்திருப்பது அறிவியல் வளர்ச்சிக்கு ஒரு சிறந்த முன்னேற்றப்பாதையாகும். இது தமிழகத்தின் கிராமப்புற ஏழை மாணவர்களும் தன் அறிவியல் தருக்க அறிவினை உலக அரங்கிற்கு இணையாகவளர்த்துக்கொள்ள ஏதுவாக அமைகின்றது.

மேலும், இதனை தமிழகத்தின் அனைத்துப் பகுதிகளுக்கும் கொண்டு செல்ல இந்திய ஆறிவியல் தொழில்நுட்ப அவையமும், இளவேனில் அமைப்பும் தமிழகத்தின் பல்வேறு உயர்கல்வி நிறுவனங்களுடன் இணைந்து பன்னாட்டுக் கருத்தரங்கங்களை நடத்தி நல்ல வரவேற்பைப் பெற்றுள்ளது குறிப்பிடத்தக்க அம்சமாகும். இக்கருத்தரங்கங்களில் பல்வேறு நாடுகளில் ஆய்வுப் பணியில் ஈடுபட்டுக்கொண்டிருக்கும் தமிழகத்தைச் சேர்ந்த அறிவியலாளர்கள் பங்கெடுத்துக்கொண்டு ஆய்வுக்கட்டுரைகளைச் சமர்ப்பித்து வருவது சிறப்பம்சமாக உள்ளது. இக்கருத்தரங்கங்களில் விவாதிக்கப்படும் ஆய்வுகளின் முடிவுகள் முழு நீளக் கட்டுரைகளாக நமது ”அறிவியல் மற்றும் தொழில் நுட்ப சஞ்சிகை” யில் பிரசுரிக்கப்பட்டு தமிழ்நாடு முழுதும் உள்ள உயர்கல்வி நிறுவனங்கட்கு வினியோகிக்கப்பட்டு வருகின்றன.

இம்முயற்சியின்மூலம் நிச்சயம் ஒரு நாள் தமிழகத்திலிருந்து,

சர். சி. வி. இராமன், டாக்டர் சுப்பிரமணியன் சந்திரசேகர், டாக்டர் ஏ. பி. ஜே. அப்துல் கலாம் மற்றும் தற்போதைய இந்திய விண்வெளி ஆய்வுக் கழகத்தின் தலைவர் டாக்டர் கை. சிவன் போன்ற மேலும் பல மிகச்சிறந்த விஞ்ஞானிகளை உருவாகி தமிழ் மொழிக்கும் தாய் நாட்டிற்கும் பெருமை சேர்ப்பார்கள் என்பது தெளிவாகத் தெரிகின்றது.

கணபதி தனிகைமோனி (1938-1986)

செந்தில்குமார் சந்திரன், க. அஜய் ஜவகர், பெ. இராமசாமி

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

கணபதி தனிகைமோனி (Ganapathi Thanikaimoni) (1 ஜனவரி 1938-5 செப்டம்பர் 1986), பெரும்பாலும் தனிகைமோனி என்றே குறிப்பிடப்படும் இவர் ஒரு இந்திய தொல் மகரந்தத்தூள் இயலாளர்.

ஆரம்ப வாழ்க்கை மற்றும் கல்வி

இவர் 1938 ஆம் ஆண்டு புத்தாண்டு தினத்தில் சென்னையில் பிறந்தார். மேலும் இவர் இந்தியாவிலுள்ள சென்னை மாநில கல்லூரியில் 1962 ஆம் ஆண்டு தாவிரவியலில் முதுகலை பட்டத்தை தாவர உருவியலமைப்பாளர் பேராசிரியர் பி.ஜி.எல்.சுவாமி வழிகாட்டுதலின் கீழ் பெற்றார். அதே நேரத்தில் இவரின் இயற்கை அறிவியல் சார்ந்த முயற்சிக்காக இவருக்கு இந்திய இயற்கைவாதிகளுக்கென ஒதுக்கப்பட்ட ஃபைசன் பரிசு வழங்கப்பட்டது. இவர் 1970 ஆம் ஆண்டில் மாண்ட்பெல்லர் பல்கலைக்கழகத்தில் முனைவர் பட்டம் பெற்றார். அவரது முனைவர் ஆய்வானது மகரந்தச் சொற்களஞ்சியம், அவற்றின் வகைப்பாடு மற்றும் இன்றும் நடைமுறையில் உள்ள 800 வகை மரபுவழி (phylogeny) உயிரினங்களின் கடின நார்வகை (Palmae) பற்றியது.

அறிவியல் வாழ்க்கை

பாண்டிச்சேரியில் (பிரஞ்சு: பாண்டிச்சேரி

ஃப்ரான்சிஸ் டே நிறுவனம்) புதிதாக நிறுவப் பட்ட (1960) பிரஞ்சு நிறுவனத்தில் மரபுவழி ஆய்வகத்தில் இவர் பேராசிரியர் கைநெட்டின் வழிகாட்டுதலின் கீழ் விஞ்ஞானி பதவியைப் பெற்றார்.

சில ஆண்டுகளில், இவரது விஞ்ஞான மற்றும் நிர்வாக திறமைகள் ஆய்வகத்தின் இயக்குநராக பதவி உயர்வு மூலம் அங்கீகரிக்கப் பட்டது. அடுத்த பத்தாண்டுகளில் அராசியே, க்ளூசியாசியே, மெனிஸ்பெர்மெசியே, மிமோ சேசியே மற்றும் சோனெரா டையாசியே போன்ற பல முக்கிய குறிப்பிடத்தக்க தொகுதிகளை அவர் வெளியிட்டார் (பாலின்ஸ் 8 (2): 7, டிசம்பர் 1985 பார்க்கவும்). இந்த வெளியீடுகளில் பெரும் பாலானவை, இனங்களின் மகரந்தவியல் உருவகம் பற்றிய முழுமையான மற்றும் துல்லியமான விளக்கத்தை அளித்ததோடு, மற்ற தாவர உறுப்புகளின் உருமாற்றத்தையும் உள்ளடக்கி, அவற்றின் சாத்தியமான பைலோ கேனி தெளிவுபடுத்தி மற்றும் அவற்றின் தேர்ந் தெடுக்கப்பட்ட வகைப்படுத்துதல் திட்டங்களை நியாயப்படுத்தினார்.

இவரின் ஆரம்ப ஆராய்ச்சியின் பெரும் பகுதி நவீன தாவரங்களின் மகரந்தத்தை கொண்டிருந்தது. பிறகு 1970 களின் பிற்பகுதியில் அவரது கவனம் புதைபடிவ மகரந்தத்தை

பற்றி மாறியது. இந்தோனேசிய அரசாங்கம் மற்றும் எக்கோலே ஃபிரஞ்சைஸ் டி எக்ஸ்டீம்-ஓரியண்ட் (EFEO) ஆகியவை இணைந்து நடத்திய பரோபடுர் நினைவுச்சின்ன நிகழ்வில் மகரந்தவியல் பற்றிய ஒரு தார்மீக விசாரணை நடத்த தனிகை அழைக்கப்பட்டார்.

600 கி.பி. முதல் 1900 கி.பி. வரையிலான யுனெஸ்கோ உலக பாரம்பரிய தளத்தின் வரலாற்றில் ஆறு கட்டங்களை அடையாளம் காண மகரந்தவியல் பகுப்பாய்வு மற்றும் அது சார்ந்த ஆய்வுகள் இவருக்கு உதவியது. 1983 ஆம் ஆண்டில் பாண்டிச்சேரியில் பிரஞ்சு மற்றும் இந்திய தொல் மகரந்தத்தூள் இயலாளர் ஆகியோருக்கு பட்டறை ஒன்றை கூட்டினார். இதில் வெப்பமண்டல ஆப்பிரிக்கா மற்றும் இந்தியாவின் வகை பிரித்தலை தெளிவுபடுத்தும் நோக்கத்துடன் விதையுறையுள்ள மகரந்தம் என்ற மூன்றாம் நிலை எல்லைகளிலிருந்து விவரிக்கப்பட்டது. இந்த திட்டத்திற்காக, தனிகையின் 20,000க்கும் மேற்பட்ட வெப்பமண்டல மகரந்தங்களின் மாதிரிகள் மதிப்பிடக்கூடிய வகையில் இருந்தது. இந்த கூட்டுறவின் முயற்சியிலிருந்து, 47 வரிகளின் ஒரு தெளிவான தொகுப்பு பெறப்பட்டு வெளியிடப்பட்டது.

மேலும் சமீபத்தில் ஆஸ்திரேலியாவின் பிரிஸ்பேன் நகரில் 7 வது ஐபிசிக்கு வெப்பமண்டல பிரதேசங்களிலிருந்து மூன்றாவது மகரந்தத்தை பற்றி ஒரு கருத்தரங்கு ஏற்பாடு செய்வதில் அவர் தீவிரமாக ஈடுபட்டிருந்தார். மேலும் தாவரவியல், தாவரத் தொல்லியல் மற்றும் சுற்றுச்சூழல் தொல்லியல் ஆய்வுகள் ஆகியவற்றில் அவரது பங்களிப்பை அங்கீகரிப்பதின் விளைவாக லண்டன் லின்னீயிய சமுதாயத்தின் ஒரு அங்கத்தவராக முனைவர் தனிகைமோனி தேர்ந்தெடுக்கப்பட்டார்.

சுற்றுச்சூழல் பாதுகாப்பு

உலகளாவிய வெப்ப மண்டல கடலோர மண்டலத்தில் உள்ள மாங்க்ரோவின் சுற்றுச்சூழலை மாசுபடுத்தும் கணிசமான பாத்திரம், மாங்க்ரோவின் குறுகிய சுற்றுச்சூழல் அமைப்பு மற்றும் சூழலில் திடீர் அல்லது வியத்தகு மாற்றங்களின் பாதிப்பு ஆகியவற்றை தெளிவாகத் அறிந்து வைத்துள்ளார். இயற்கை

அல்லது மனிதனால் உருவாக்கப்பட்ட பேரழிவு நிகழ்வுகள் அல்லது சூறாவளிகள் போன்ற தாக்கங்களினால் ஏற்படும் பாதிப்புகளிருந்து மாங்க்ரோவ் காடுகள் மீளுவதில்லை. இவர் புதுச்சேரி கரையோரப் பாதுகாப்பு, வறண்ட பகுதிகளின் மறுவாழ்வு மற்றும் உள்ளூர் சுற்றுச்சூழலில் மனித வளர்ச்சியின் பாதிப்பு தொடர்பான நிகழ்வுகளை அரசாங்கத்திற்கு அறிவுறுத்தினார்.

இவர் சுற்றுச்சூழல் பாத்திரத்தை கவனத்தில் வைப்பதில் மிகப்பெரிய கருவியாக இருந்தார். மேலும் சதுப்பு அலைகள் (சுனாமி) மற்றும் நில அரிப்பு ஆகியவற்றிலிருந்து கடலோரப் பகுதிகளை பாதுகாப்பதில் சதுப்புநில சூழல் அமைந்துள்ளது. அவர் பிச்சாவரம் சுற்றுச்சூழலின் சதுப்புநிலத்தை மையமாகக் கொண்டு விஞ்ஞான முன்னெடுப்புகளை முன்னெடுத்தார். அவர் யுனெஸ்கோவின் ஆசிய மற்றும் பசிபிக் மாங்க்ரோவ் திட்டத்தில் பல்வகைப்பட்ட ஒருங்கிணைந்த முன்முயற்சியில் ஈடுபட்டிருந்தார். மேலும் நிலையான பயன்பாடு மற்றும் நிர்வாகத்திற்கான சதுப்பு நில சூழல் அமைப்புகளின் அமைப்பு மற்றும் செயல்பாட்டை நன்கு புரிந்து கொண்டார்.

மாங்க்ரோவ் சூழலியலுக்குட்பட்ட எல்லையில் தனியின் அறிவியல் பங்களிப்பினை அவர் இறந்த பிறகு வெளியிடப்பட்ட தாவரத் தொல்லியல் கையேட்டில் பதிவு செய்யப்பட்டுள்ளது. கடந்த காலத்தில் வயது வந்த மாங்க்ரோவ் தாவரங்கள் இருந்து மகரந்தம் அடையாளம் காண்பதற்கான ஒரு முக்கிய குறியீடான முதல் வகுப்பு வேலையை அவர் விட்டுவிட்டார்.

குறப்பு

அவர் செப்டம்பர் 5, 1986 ஆம் ஆண்டு அமெரிக்காவுக்கு பான் ஆம் விமானம் 73 என்ற விமானத்தில் பறந்து கொண்டிருந்தபோது பாகிஸ்தானிலுள்ள கராச்சியில் கடத்திச் செல்லப்பட்டார். துப்பாக்கிச் சண்டையின் போது தலையில் காயமடைந்த தனி பாகிஸ்தானிய கமாண்டோக்களின் விமானத்தைத் தகர்த்தெறிந்ததோடு பயங்கரவாதிகளை கொல்வதற்கான முயற்சியையும் தொடர்ந்தார்.

அவர் குண்டுகள் தாக்கியபோது ஒரு குழந்தைக்கு உதவி செய்ய முயற்சி செய்ததாக கூறப்பட்டது. மேலும் பயங்கரவாதிகள் நடத்திய தாக்குதலில் வெடித்துச் சிதறியிருந்தது. இவர் 6-12 செப்டம்பர் மாதம் அன்று அமெரிக்காவின் மாசசூசெட்ஸில் உள்ள வூட்ஸ் ஹோல் கடலியல் நிறுவனத்தால் நடத்தப்பட்ட யுனெஸ்கோ வழங்கிய இரண்டாம் சர்வதேச மாநாட்டில் தோல்-கடலியல் பற்றிய கருத்தரங்கில் அவர் உரையாற்ற அழைக்கப்பட்டார்.

மரபுரிமை

2010 இல் மகரந்தவியல் ஆய்வகத்தின் 50வது ஆண்டு விழா கொண்டாட்டத்தின் போது பாண்டிச்சேரி பிரஞ்சு நிறுவனம் 22,000 மகரந்த மாதிரிகள் சேகரிப்புக்கு முனைவர் தனிகைமோனியின் மகரந்த குறிப்பை பாராட்டும் வகையில் முனைவர் ஜி. தனிகைமோனியின் பெயரை வைத்து கௌரவித்தது.

தனிகைமோனிக்கு பின்னர் பெயரிடப்பட்ட மூன்றாம் நிலை ஸ்போர்ட்ஸ் மற்றும் மகரந்தம்:

❖ ரெடிமோனோகோல்பிட்ஸ் தனிகைமோனி (தர்கேஷ்வர் உருவாக்கம், ராஜ்பாடி, காம்பாய் பேசின், குஜராத், இந்தியா)

❖ ச்பினிசொனோ கோல்பிட்ஸ் தனிகைமோனி (தர்கேஷ்வர் உருவாக்கம், ராஜ்பாடி, காம்பாய் பேசின், குஜராத், இந்தியா)

❖ வார்க்கல்லோபோல்லைன்னைட்ஸ் தனிகைமோனி (கிளிஃப் பிரிவு, வர்கல்லி உருவாக்கம், வர்கலா, கேரளா, இந்தியா)

நூற்பட்டியல்

❖ எரியோகௌலக்ஸியேயின் மகரந்தச் சொற்களஞ்சியத்திற்கு பங்களிப்பு. மகரந்தச் செடிகள் 7: 181-191. 1965.

❖ உதிர்குலரியாவின் மகரந்த மரபணு உருவகம். மகரந்தச் செடிகள் 8: 265-284. 1966.

❖ லே டுடேபாலினோலாகிக்யு டெஸ் பால்மியர்ஸ் ஒரு பங்களிப்பு. பாண்டிச்சேரி ஃப்ரான்சிஸ் டே நிறுவனம், ட்ரே. பிரிவை. சைன். டெக். (2): 1-92.1966.

❖ சொன்னரடியசியே என்ற மகரந்தவியல் உருமாற்றம். பாண்டிச்சேரி ஃப்ரான்சிஸ் டே நிறுவனம் தர்சிவ். பிரிவை. சைன். டெக். 5(2): 1-12. 1966 (டிஎம்ஏ. ஜெயவீரா உடன்).

❖ உருமாற்றம் டெஸ் மகரந்த டெஸ் மெனிஸ்பெர்மக்ஸியே. பாண்டிச்சேரி ஃப்ரான்சிஸ் டே நிறுவனம் தர்சிவ். பிரிவை. சைன். டெக். 5(4): 1-57.1968.

பிழைப்புகள்

1. Blasco.F.G. (1986). Thanikaimoni, 1938-1986, Pollen et Spores,28(3-4),259 264.
2. Chanda.S. (1987). Obituary (G.Thanikaimoni, 1938-1986), Science and Culture, 53(3),76-74.
3. Shripad, N.A. (1987). G.Thanikaimoni, 1938-1986, Grana,26(1),1-4.
4. References Chanda.S. (1987). Obituary Dr.G.Thanikaimoni, 1938-1986, Geophytology,17(1),122-123.
5. Pocock.S.A.J. (1986). G.Thanikaimoni: a memorial, CAP Newsletter,9(2),21.

தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகக் குறிப்பும் பொருள் (BND) பற்றிய ஓர் அறிமுகம்

முனைவர் நா. விஜயன்¹ தா.கீர்த்திவாசன்^{1, 2}
ரவீந்தர்குமார்¹ நக்மா ஃகான்¹ முனைவர் ஆர்.பி.பந்த்¹

¹ தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம், நியூதில்லி 110 012

² அமிட்டி பல்கலைக்கழகம், நொய்டா, உத்திர பிரதேசம் 201 313

மின்னஞ்சல் : nvijayan@nplindia.org <mailto:nvijayan@nplindia.org>

தொலைப்பேசி : 01145608263

1. முன்னோட்டம்

மக்களின் வாழ்வாதாரத்தை எளிமை ஆக்குவதில் எஸ்ஐ அலகுகள் முக்கியத்துவம் வகிக்கின்றன. இவை உலக அளவில் அனைவருக்கும் ஒன்றாக அமைவதுடன், மக்களுக்கு நம்பிக்கையும் உண்மையான தகவல்களையும் தருகின்றன. நாம் வேறு நாடுகளுக்குச் சில பொருட்களை ஏற்றுமதி செய்யும்பொழுது இரு நாடுகளும் வெவ்வேறு தர அளவீடுகளைப் பின்பற்றினால் அது குழப்பத்தை உண்டாக்கும். அனைத்து நாடுகளும் ஒரே தர அளவீட்டைப் பின்பற்றுவதற்கு எஸ்ஐ அலகுகள் ஒரு முக்கியக் காரணமாகும். கிலோகிராம் (Kilo gram), வினாடிகள் (Second), கெல்வின் (Kelvin), ஆம்பியர் (Ampere), மோல் (Mole) ,கேண்டலா (Candela), மீட்டர் (Meter) என ஏழு எஸ்ஐ அலகுகள் வழக்கில் உள்ளன.

2. தேசிய அளவியல் நிறுவனம்

இந்தியாவில் தில்லியில் உள்ள தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம் மேற்கூறிய ஏழு எஸ்ஐ அலகுகளின் (படம்-1) முதன்மைத் தர நிலையை நிறுவகிக்கிறது. இந்தியாவின் தேசிய அளவியல் நிறுவனத்தை தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம் நிர்வகிக்க வேண்டும் என்று பாராளுமன்றச் சட்டம் மற்றும் சட்ட நெறிமுறைக்கான விதிகள்



படம்-1

1956ஆம் ஆண்டு உருவாக்கப்பட்டன. இந்தத் தேசிய அளவியல் நிறுவனம்தான், இந்தியாவின் தரமான அளவீடுகளைப் பராமரிக்கிறது.. இது போன்ற தேசிய அளவியலான நிறுவனங்கள் உலகில் அனைத்து நாடுகளிலும் உள்ளன. உலக அளவில் புகழ் வாய்ந்த ஒரு சில தேசிய அளவியல் நிறுவனங்கள் பின் வருமாறு:

I. அமெரிக்கா (USA): தேசியத் தரம் மற்றும் தொழில்நுட்ப நிறுவனம். (National Institute Of Standard and Technology - NIST)

II. தாய்லாந்து (Thailand): தாய்லாந்து தேசிய அளவியல் நிறுவனம் (National Institute

of Metrology of Thailand - NIMT)

III. ஐக்கிய ராஜ்ஜியம் (UK): ஐக்கிய ராஜ்ஜியத்துக்கான தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம் (National Physical Laboratory Of UK - NPL UK)

IV. ஜெர்மன் (German): இயற்பியல் - டெக்னிஷ்சு பண்டேஸ்டன்டால் (Physikalisch - Technische Bundesanstalt - PTB)

V. ஜப்பான் (Japan): ஜப்பானுக்கான தேசிய ஆய்வியல் நிறுவனம் (National Metrology Institute Of Japan - NMIJ)

VI. சீனா (China): சீனா விற்கான அளவியல் நிறுவனம் (China Metrological Administration - CMA)

3. தேசிய ஐயற்பியல் ஆய்வகம்; இந்தியா (NPLI)

தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம், அறிவியல் மற்றும் தொழில்நுறை ஆராய்ச்சிக் கழகத்தின் கீழ் அமைக்கப்பட்ட பழமையான தேசிய ஆய்வகங்களில் ஒன்றாகும். மறைந்த முன்னாள் பிரதமர் ஜவஹர்லால்நேரு அவர்கள் 1947 ஆம் ஆண்டு ஜனவரி 4ஆம் தேதி தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகத்திற்கு அடித்தளக் கல் நட்டார். டாக்டர் கே.எஸ்.கிருஷ்ணன் அவர்கள் ஆய்வகத்தின் முதல் இயக்குநர் ஆவார்.

இந்தியாவிற்கான நிலையான அளவை நிர்வகித்தல் மற்றும் அளவிடுதல் என்பவை இந்தத் தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகத்தின் பணிகள் ஆகும். இயற்பியல் சார்ந்த ஆராய்ச்சிகளை வலுப்படுத்தவும், அறிவியல் கண்டுபிடிப்பு மூலம் நாட்டை வளர்ச்சிப்பாதையில் கொண்டுசெல்லவும் உருவாக்கப்பட்டதே இந்த தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம் ஆகும். தேசியத் தர நிலையில் இயற்பியல் அளவீட்டை அறிமுகப்படுத்துதல், அங்கிகரித்தல், பாதுகாத்தல், பராமரித்தல், மேம்படுத்துதல், கவனித்தல் என்பவை தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகத்தின் பணிகளாகும்.

நாம் பெறும் தகவல்கள் அளவியல் பூர்வமாக கண்டறியப்பட வேண்டும். நாம் பெறும் குறிப்புப் பொருளின் பண்புகள் பின்னர் எண்மதிப்புக்கு மாற்றப்பட்டால் அது அமைப்பின்

நிலையான அளவீடுகளுடன் தொடர்புடையதாக இருக்க வேண்டும் (படம்-2).



படம்-2

சோதனை நடைமுறையில் பகுப்பாய்வு செய்யப்படும்வரை குறிப்புப்பொருளின் அளவீட்டு வரையறையைப் போலவே இருக்கும். குறிப்புப் பொருளின் தயாரிப்பாளருக்கு உறுதிப்படுத்த போதுமான ஆதாரம் இருக்க வேண்டும். எனவே அதை நிலையான அளவீடுகளுடன் ஒப்பிடுவதன் மூலம் அவர் உறுதிப்படுத்த வேண்டும்.

4. தேசிய ஐயற்பியல் ஆய்வகத்தின் பங்களிப்பு

I. அழியாத மை

தேர்தல் நேரத்தில் நம் விரலில் வைக்கும் மை தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகத்தின் உருவாக்கம் ஆகும். 1951 ஆம் ஆண்டு இது பயன்பாட்டுக்கு வந்தது. அதுமட்டுமன்றி இந்த அழியாத மை இலங்கை, இந்தோனேஷியா, துருக்கி முதலான ஜனநாயக நாடுகளுக்கு அனுப்பப்பட்டது.

II. காற்றுத்தரக் கண்காணிப்பு நிலையம், பாலம்பூர்.

தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகத்தால், காற்றுத்தரக் கண்காணிப்பு நிலையம் பாலம்பூரில் உள்ள ஹிமாலையன் பையோரிசோர்ஸ் தொழில்நுட்ப நிறுவனத்தில் அமைக்கப்பட்டது. இந்நிறுவனம் இந்தியப் பெருநகரங்களின் காற்று மாசுபாட்டைக் கண்காணித்து வருகின்றது.

III. தங்கத்தின் தரம்

இந்தியாவின் முதல் குறிப்புப் பொருள் BND - 4021 தங்கம் 99.99% தூய்மை கொண்டது. இது தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம், பாபா அணு ஆராய்ச்சி மையம் மற்றும் மிண்ட் ஹைத்ராபாத் ஆகிய நிறுவனங்களால் உருவாக்கப்பட்டது.

5. இந்தியக் குறிப்புப் பொருள்

இரசாயணப் பொருட்கள், எரிபொருள்கள், உணவுத் தாதுக்கள், கனிமங்கள் ஆகியவற்றின் தர நிர்ணயத்தை இந்தியக் குறிப்புப் பொருள் (Indian Reference Material) வழங்குகிறது. இதனை தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம் BND என்ற பெயருடன் முத்திரைப் (படம்-3) பதித்துள்ளது. மற்ற நாடுகளால் வழங்கப்படும்



படம்-3

குறிப்புப் பொருள் விலை உயர்ந்தவை மற்றும் அவற்றைப் பெறுவதற்கு மிகுந்த கால தாமதம் ஏற்படுகின்றது. இதனால், இந்திய தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகத் தயாரிப்பால் உருவான குறிப்புப் பொருட்களால் அந்நிய செலவானி கையிருப்புக் கூடி இந்தியாவின் பொருளாதாரத்தை வலுப்படுத்துவதற்கு வழி கொள்கிறது. இதை இந்தியாவின் தயாரிப்பு என்று எண்ணிப் இந்தியர்களாகிய நாம் பெருமிதமும் கொள்கிறோம். இந்தியக் குறிப்புப் பொருள் பிரிவில் உள்ள பாரதிய நிர்தேஷ் ட்ரவிய (BND) குழு, பலவிதமான ஆய்வுகளுக்கு பயன்படும் கருவிகளுக்காக

குறிப்புப் பொருளைத் தயாரிக்கிறது. இது தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகத்தாலும் மற்றும் இதன் மேற்பார்வையின் கீழ் தனியார் நிறுவனங்களாலும் தயாரிக்கப்படுகிறது. தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகத்தில் ஆறு ஆய்வகக் குழுக்கள் உள்ளன. அவற்றுள் ஒன்று இந்தியக் குறிப்புப் பொருள் ஆராய்ச்சி குழு ஆகும் (BND). இக்குழுக்கள் பலவிதமான ஆராய்ச்சிகளை மேற்கொள்கின்றன.

துகள் எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு (Powder X-Ray Diffraction) விளைவு மூலம் லேட்டிஸ் பரிமாணங்கள், நிலைகள், அழுத்தம், திரிபு மற்றும் படி அளவுகளை எளிதில் தெரிந்துகொள்ளலாம். அணு அளவிலான அளவீடுகளைச் செய்வதற்குத் துல்லியமான அளவீடுகள் தேவை. இதை வைத்து ஒரு பொருளின் சரியான பண்புகளை வெளிப்படுத்த முடியும். இந்தியாவில் ஒவ்வொரு ஆண்டும் அதிக அளவிலான துகள் எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவு இயந்திரங்கள் பல்வேறு நோக்கங்களுக்காக வெளிநாடுகளில் இருந்து இறக்குமதி செய்யப்படுகின்றன. இந்த இயந்திரங்களைப் பல்கலைக்கழகங்கள் மற்றும் தொழில்துறை நிறுவனங்கள் பல்வேறு ஆராய்ச்சிகளுக்காகப் பயன்படுத்தப்படுகின்றன.

அந்த இயந்திரங்களுடன் குறிப்புப் பொருளையும் நாம் வாங்குகிறோம். இதனால் நமக்கு பல்வேறு வகையான இழப்புகள் ஏற்படுவதோடு, இரண்டு அல்லது மூன்று ஆண்டுகளுக்கு ஒருமுறை குறிப்புப் பொருளை மாற்ற வேண்டிய கட்டாயத்திற்கு உட்படுகிறோம்.

துகள் எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவானது, ஆய்வுத்துறையில் மிக முக்கியமான பங்கினை வகிக்கின்றது. இது பொருட்களின் பண்புகளைத் தெரிந்துகொள்வதற்கும் மற்றும் அதன் லேட்டிஸ் பரிமாணத்தைக் கண்டுபிடித்து அதன் படி அமைப்பைத் தெரிந்து கொள்வதற்கும் பயன்படுகிறது. மேலும் துகள் எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவு, மருத்துவம், சுரங்கம், சுங்கம் முதலான எண்ணற்ற துறைகளில் முக்கியப் பங்கினை வகிக்கின்றது. இந்தக் கருவிகள் சரியான அளவீடுகளைக் கொடுக்கின்றனவா இல்லை தவறான அளவுகளைக் கொடுக்கின்றனவா என்பது பயன்படுத்தப்பெறும் கருவி, குறிப்புப் பொருளைச் சார்ந்துள்ளது. ஒரு வேளை, கருவிகள் தவறான விவரங்களைக் கொடுத்தால் அது பல சிக்கலான விவரங்களையும்

அதனுடன் சேர்த்து தவறான முடிவுகளையும் கொடுப்பதற்கான வாய்ப்புகள் அதிகம் உள்ளன.

உதாரணமாக, சுரங்கத்திலிருந்து கிடைக்கும் பொருட்களில் பல விலை மதிப்பற்ற உலோகங்கள் அடங்கும். ஒருவேளை, துகள் எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவானது, அந்தச் சுரங்கத்திலிருந்திருந்து கிடைத்த பிளாட்டினத்தைத் தவறாக அலுமினியம் என்று காண்பித்தால் பல மில்லியன் ரூபாய் இழப்பு அந்த சுரங்க முதலாளிகளுக்கும் இந்திய அரசுக்கும் ஏற்படுகிறது. இதன்மூலம் இந்தியக் குறிப்புப் பொருளின் மிகுந்த முக்கியத்துவம் அனைவருக்கும் புரியும்.

தவறான விவரங்களை அளித்த துகள்

எக்ஸ் கதிர் விளிம்பு விளைவு கருவியைக் குறிப்புப் பொருள் மூலம் கிடைத்த தகவலைக் கொண்டு பொறியாளரால் மட்டுமே சரி செய்ய முடியும். இத்தகு குறிப்புப் பொருளைத் தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம் தொடர்ந்து உற்பத்தி செய்கிறது. குறிப்பாக ஆல்பா ஆலுமினா, ஆல்பா க்வார்ட்ஸ், சிலிக்கான் முதலான குறிப்புப் பொருள்களைத் தேசிய இயற்பியல் ஆய்வகம் உருவாக்குகிறது. இத்தகு சிறப்புகளுக்குரிய இந்த ஆய்வகம் தொடர்பான விரிவான தகவல்களை <http://www.nplindia.in>, <http://www.nplindia.in/bhartiya-nirdeshak-dravya-bnd-indian-reference-materials> என்ற இணைய தளம்வழித் தெரிந்துகொள்ளலாம்.

மேற்கோள்:

- 1) <https://www.thehindu.com/business/indian-scientists-unveil-home-grown-gold-standard/article18447892.ece>
- 2) <https://blog.mygov.in/csirs-memorable-mark-with-indelible-ink/>
- 3) <https://blog.mygov.in/csir-npl-launches-indias-first-pristine-air-quality-monitoring-station-at-palampur/>

சுழல் சங்கரநாராயணன்-இராமசாமி (RSR) நுட்பம் என்ற புதிய படிக்க வளர்த்தல் முறையை பயன்படுத்தி நேர்சார்பிலா ஒளியியல் பயன்பாட்டிற்காக 2-அமினோபிரிடீனியம் 4-நைட்ரோபீனாலேட் 4-நைட்ரோபீனால் (2AP4N) படிக்கம் வளர்த்தல்

பி. கருப்பசாமி¹, த. கமலேஷ்¹, முத்து செந்தில் பாண்டியன்^{1*}, பெ. இராமசாமி¹, சுனில் வர்மா²

1. இயற்பியல் துறை, எஸ் எஸ் என் பொறியியல் கல்லூரி, காலவாக்கம், சென்னை-603110. தமிழ்நாடு.

2. லேசர் பொருட்கள் மேம்பாடு மற்றும் சாதனங்கள் பிரிவு, அணுசக்தித் துறை, ராஜா ரமன்னா சென்டர் ஃபார் அட்வான்ஸ்ட் டெக்னாலஜி, இந்தூர்-452013,

ஆய்வுச்சுருக்கம்

2-அமினோபிரிடீனியம் 4-நைட்ரோபீனாலேட் 4-நைட்ரோபீனால் (2APNP) ஒற்றை படிக்கமானது சுழல் சங்கரநாராயணன்-இராமசாமி (RSR) முறை மூலம் வெற்றிகரமாக (001) திசையில் 60 நாட்களில் வளர்க்கப்பட்டது. ஆரம்பத்தில் 2AP4N விதை படிக்கமானது மெதுவாக ஆவியாதல் தொழில் நுட்பம் முறை (SEST) மூலம் வளர்க்கப்பட்டது. வளர்ந்த படிக்கத்தின் அலகு செல் அளவுருவை ஒற்றை படிக்க X-கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்விற்கு உட்படுத்தப்பட்டது. படிக்கத்தின் தரம் மற்றும் RSR படிக்கத்தின் வளர்ந்த தளம் ஆகியவற்றை துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்வை பயன்படுத்திப் கண்டறியப்பட்டது. படிக்கத்தின் ஒளியியல் தரமானது புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வு மூலம் கண்டறியப்பட்டது. மேலும், ஒளியியல் பட்டை இடைவெளியின் ஆற்றல் மதிப்பு கணக்கிடப்பட்டது. வளர்ந்த படிக்கத்தின் கடினத்தன்மை விக்ரர்ஸ் நுண்கடினத்தன்மை ஆய்வின் மூலம் உறுதி செய்யப்பட்டது. ஒற்றை படிக்கத்தின் லேசர் சேதம் முடுக்க மதிப்பு Nd: YAG லேசரை பயன்படுத்தி அளவிடப்பட்டது. 2AP4N ஒற்றை படிக்கத்தின் ஈரிசைவியக்க செயல்திறன் (SHG) குரூட்ஷ்-பெர்ரி தூள் நுட்பத்தைப் பயன்படுத்தி வெவ்வேறு துகள் அளவைக் கொண்டு பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது. அனைத்து பண்புகளிலும் RSR படிக்கமானது முதன்மையாக உள்ளது. இதனால், உயர் செயல்திறன் கொண்ட நேர்சார்பிலா ஒளியியல் சாதன பயன்பாடுகளுக்கு RSR படிக்கமானது ஏற்றதாக இருக்கும்.

1. அறிமுகம்

நேர்சார்பிலா ஒளியியல் பொருட்களின் முக்கிய பண்புகளான அதிக நேர்சார்பிலா ஒளியியல் குணகம் மற்றும் அதிவிரைவு பதிலளிப்பு திறன் ஆகிய குணங்களை கொண்ட கரிம படிக்கங்களின் ஆராய்ச்சியில் பெரும்பாலான ஆராய்ச்சியாளர்கள் ஆர்வமாக உள்ளனர். லேசர் தொழில்நுட்பம், ஒளியியல் அளவுரு அலைவுகள், ஒளியியல் தகவல் செயலாக்கம் மற்றும்

ஒளியியல் தரவு சேமிப்பு தொழில்நுட்பம் போன்ற பல்வேறு பகுதிகளில் நேர்சார்பிலா ஒளியியல் படிக்கங்களின் பயன்பாடுகள் அதிகமாக உள்ளன [1-2]. பல்வேறு வகையான நேர்சார்பிலா ஒளியியல் பொருட்களைக் காட்டிலும், கரிம இனப் பொருட்கள் நல்ல குணங்கள் கொண்டுள்ளன. அவைகள், அதிகமான உயர் லேசர் மேற்பரப்பு சேதச் சிதைவு, பரந்த வெளிப்படைத்தன்மை சாளரங்கள், விரிவாக்கப்பட்ட வெப்ப நிலைத் தன்மை, மிக எளிதில் புனைதல் மற்றும்

சாதனங்களுடனான ஒருங்கிணைப்பு ஆகிய வற்றின் காரணமாக பெரும்பான்மை வகிக்கிறது [3]. 4-நைட்ரோபீனால் (4NP) வகையைச் சார்ந்த பொருள்களில் பொதுவாக ஒற்றை பரிமாண வழங்கி (OH) மற்றும் ஏற்பி (NO₂) அமைப்பானது சாதகமாக உள்ளது. இதன் காரணமாக 4-நைட்ரோபீனால் கொண்டுள்ள பல்வேறு கரிம மற்றும் கனிம பொருட்களின் உயர்ந்த முனைவாகுத் தன்மை பண்பினை அதிக அளவில் பெற்றுள்ளது [4].

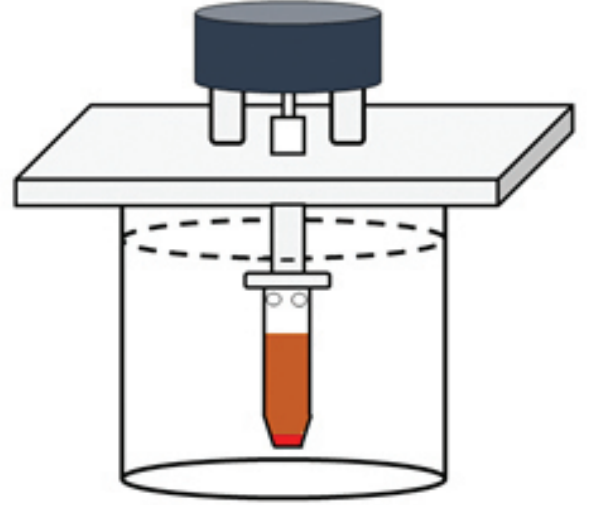
இருமுனைக் குரோமோபோர் மற்றும் பல்வேறு கரிமப் பொருட்களில் புரோட்டான் பரிமாற்றத்தின் சாத்தியக்கூறுகள் வலுவான ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு மூலம் இணை-கலவைகள் உப்புக்களை உருவாக்குவதில் வல்லமை படைக்கின்றன. இந்த ஹைட்ரஜன் பிணைப்பில் போதுமான வலிமை மற்றும் திசை உள்ளதால் மூலக்கூறு கூட்டமைப்பு எளிதில் கட்டுப்படுகிறது. இந்த கட்டுப்பாடு நம்பகத்தன்மை மற்றும் மறு பொருளாக்கம் செய்வதற்கு போதுமானதாக இருக்கும். 2-அமினோபிரிடீனியம் கரிம மற்றும் கனிம வேதியியல் மிகவும் முக்கியமான பொருளாகும். 2-அமினோபிரிடீன் பெரிய ஒத்த வடிவ இணைக்க நெகிழ்வு மற்றும் ஹைட்ரஜன் பிணைப்பை எளிதில் உருவாக்கும் திறன் கொண்டுள்ளது. இந்த பண்புகள் இந்த செய்முறை நிகழ்வில், 2-அமினோபிரிடீன் குழுவானது 4-நைட்ரோபீனால் (4NP) மூலக்கூறின் ஹைட்ராக்சில் (OH) குழுவில் இணைந்து 2-அமினோபிரிடீனியம் 4-நைட்ரோபீனாலேட் 4-நைட்ரோபீனால் (2AP4N) படிக்கம் உருவாகிறது.

தற்போதைய ஆராய்ச்சியில், 2-அமினோ பிரிடீனியம் 4-நைட்ரோபீனாலேட் 4-நைட்ரோபீனால் (2AP4N) என்ற கரிம நேர்ச்சார்பிலா ஒளியியல் (NLO) படிக்கம் “சுழல் சங்கரநாராயணன்-இராமசாமி (RSR) நுட்பம்” என்ற புதிய படிக்க வளர்த்தல் முறையை பயன்படுத்தி வளர்க்கப்படுகிறது. வளர்க்கப்பட்ட சுருக ஒற்றை படிக்கமானது நடைமுறையில் இருக்கும் SR முறை மூலம் வளர்க்கப்பட்ட படிக்கத்தை காட்டிலும் சிறப்பாக உள்ளது [5]. வளர்ந்த படிக்கத்தில், ஒற்றை படிக்க X-கதிர் விளிம்பு

விளைவு, துகள் படிக்க X-கதிர் விளிம்பு விளைவு, புற ஊதா பகுதி-கட்டிலு ஒளி-அகச்சிவப்பு நிறமாலை, கடினத்தன்மை பகுப்பாய்வு, லேசர் மேற்பரப்பு சேதச் சிதைவு மதிப்பு மற்றும் ஒற்றை படிக்கத்தின் ஈரிசைவியக்க செயல்திறன் (SHG) குர்ட்ஷ்-பெர்ரி தூள் நுட்பத்தைப் பயன்படுத்தி வெவ்வேறு துகள் அளவைக் கொண்டு பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது.

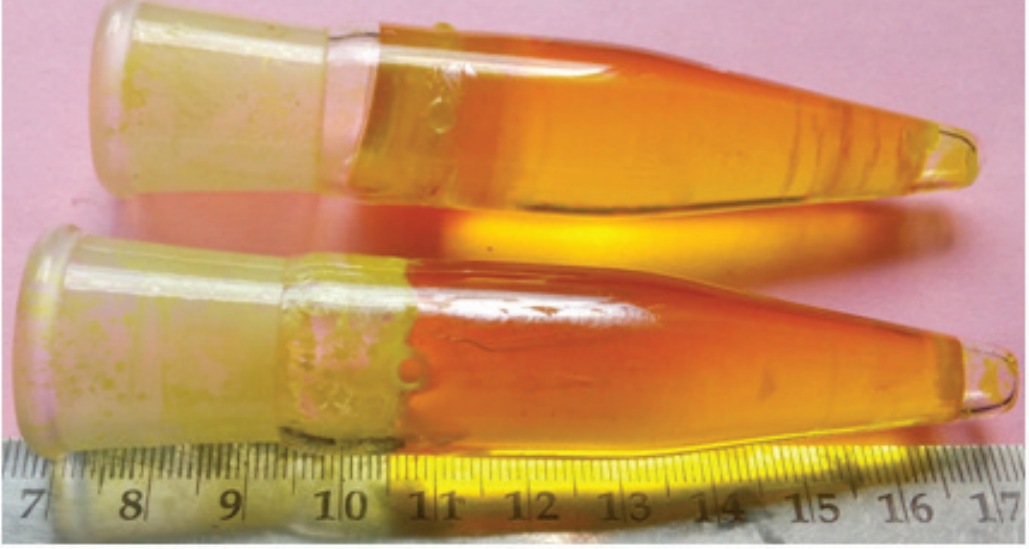
2. செய்முறை

2.1 சுழல் சங்கரநாராயணன்-இராமசாமி (RSR) படிக்க வளர்ச்சி முறை:



படம் 1. RSR படிக்க வளர்த்தல் முறை

அதிக நேர்ச்சார்பிலா ஒளியியல் பண்புகள் கொண்ட பெரிய வடிவிலான படிக்கங்கள் மிகவும் முக்கியத்துவம் உடையதாக கருதப்படுகிறது. எனவே ஒற்றை திசைச்சார் படிக்க வளர்த்தல் முறையான சங்கரநாராயணன்-இராமசாமி (SR) முறை மிகவும் முக்கியமானதாகும் [6-7]. ஆனால், இந்த படிக்க வளர்த்தல் முறையில் மாசு பொருளானது பரவலாக படிவதால், வளர்க்கப்பட்ட படிக்கத்தின் ஒளியியல் தன்மை குறைகிறது [8-9]. இதனை தடுக்க முதன் முதலாக சுழல் சங்கரநாராயணன்-இராமசாமி (RSR) படிக்க வளர்ச்சி முறை அறிமுகப்படுத்தப்பட்டு, 2AP4N படிக்கம் வளர்க்கப்பட்டது. RSR செயல்முறை படமானது படம் 1-ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது.



படம் 2. சுருசு முறையில் வளர்ந்த படிகங்கள்

பலவகையான உபகரணங்களான போரோசில் கண்ணாடி, டெஃலான் தாள்கள் மற்றும் படிநிலை மின்னோடி கட்டுப் படுத்தி கொண்டு RSR படிக வளர்ப்பு தொட்டி உருவாக்கப்பட்டது. முதலில் நல்ல செறிவூட்டப்பட்ட கரைசலை தயார்செய்து, அதனை 5000 மி.லி கொண்ட போரோசில் கண்ணாடி பாத்திரத்தில் எடுத்துக் கொள்ளப் படுகிறது. எடுத்த கரைசலை நீர்த்தொட்டியில் வைத்து 40°C மாறா-வெப்ப நிலையில் ஒரு நாள் வைக்கப்படுகிறது. இதன் மூலம் சமநிலை கரைசலை உருவாக்கலாம். அடுத்தது, படிக வித்தை கொண்ட சூழல் அச்சை தயார் படுத்தி, அதனை தயார்செய்த கரைசலில் மூழ்கடிக்கப்படுகிறது. வெப்ப-நீர் கலனை கொண்டு கரைசலை 2°C-க்கு உயர்த்தி, பின்பு குறைக்கப்படுகிறது. இதனால் விதை படிகத்தின் மேற்பரப்பு சீரமைக்கப்பட்டு, நல்ல இணைப்பானது கரைசலுக்கும் விதை படிகத்தின் மேற்பரப்பிற்க்கும் உருவாகிறது. மெதுவாக குளிர்வூட்டுவதன் மூலம், கரைசலின் அடர்த்தி அதிகரிக்கப்பட்டு படிகத்தின் வளர்ச்சி தொடங்குகிறது. மாசு படிகவதனை தடுக்க கண்ணாடி குமிழ் 10 RPM வேகத்தில் முன்னும் மற்றும் பின்னும் 5 சுற்று விகிதத்தில் சுற்றப்படுகிறது. குளிர்வூட்டு விகிதம் 0.2-0.3°C/நாள் என்று கரைசலுக்கு வழங்கப்படுகிறது. நன்றாக வளர்ந்த படிகங்களை

படம் 2-ல் காணலாம்.

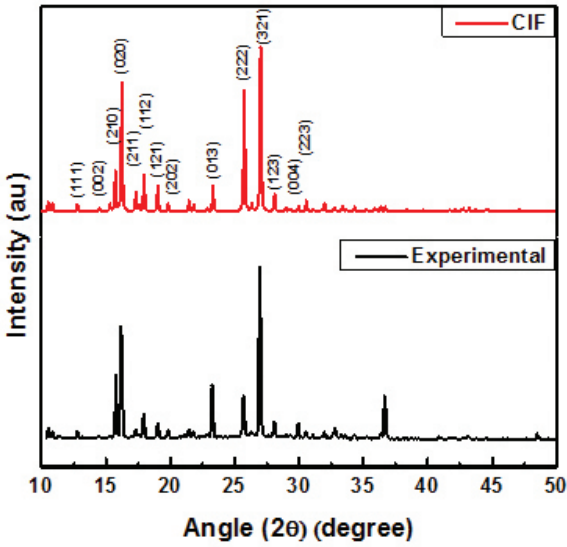
3. பண்பறிதல் பகுப்பாய்வு

வளர்ந்த 2- அமினோபிரிடீனியம் 4-நைட்ரோ பீனாலேட் 4-நைட்ரோபீனால் (2AP4N) ஒற்றை படிகமானது பல்வேறு பண்பறிதல் ஆய்வுக்கு உட்படுத்தப்பட்டது. வளர்ந்த ஒற்றை படிகத்தின் சிற்றளவு பரிமாணங்கள் ப்ரூக்கர் கப்பா APEXII ஒற்றை படிக X-கதிர் விளிம்பு விளைவு MoK α ($\lambda = 0.7107 \text{ \AA}$) ஆய்வினை பயன்படுத்திப் பெறப் பட்டன. படிகத்தின் தரம் மற்றும் வளர்ந்த தளம் ஆகியவற்றை துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு CuK α ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) ஆய்வினை பயன்படுத்திப் கண்டறியப்பட்டது. ஒளியியல் பண்புகளை பெர்கின்-எல்மர் லாம்ப்டா-35 புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை மூலம் 200-1100 nm வரம்பில் ஆய்வு செய்யப்பட்டது. வளர்ந்த படிகத்தின் கடினத்தன்மை விக்ஃர்ஸ் நுண்கடினத்தன்மை ஆய்வின் (Ånk£R HMV-21) மூலம் உறுதி செய்யப்பட்டது. Nd: YAG லேசரை பயன்படுத்தி (7 ns k%W« 10 Hz) படிகத்தின் லேசர் சேதம் முடுக்கம் மதிப்பு அளவிடப்பட்டது. ஈரிசைவியக்க செயல்திறன் (SHG) குர்ட்ஷ்-பெர்ரி தூள் நுட்பத்தைப் பயன்படுத்தி வெவ்வேறு துகள் அளவைக் கொண்டு பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது.

4. முடிவுகள் மற்றும் விவாதங்கள்

4.1 ஒற்றை படிக ஒ-கதிர் விளிம்பு விளைவு

2-அமினோபிரிடீனியம் 4-நைட்ரோ பீனாலேட் 4-நைட்ரோபீனால் (2AP4N) ஒற்றை படிகமானது செஞ்சாய்சதுரம் அமைப்புடன், Pna21 இடக்குழுவோடு கொண்டுள்ளது. கணக்கிடப்பட்ட அலகுகள் கூடு அளபுருக்கள் $a = 10.957 (\pm 0.010) \text{ \AA}$, $b = 12.246 (\pm 0.011) \text{ \AA}$, $c = 13.152 (\pm 0.011) \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ மற்றும் பருமன் (V) = $1758 (\pm 5) \text{ \AA}^3$. படிகத்தின் தற்போதைய அலகுகள் கூறு அளபுருக்கள், முன்னர் அறிவிக்கப்பட்ட அளவு மதிப்புகளுடன் [4] ஒத்து இருக்கிறது.

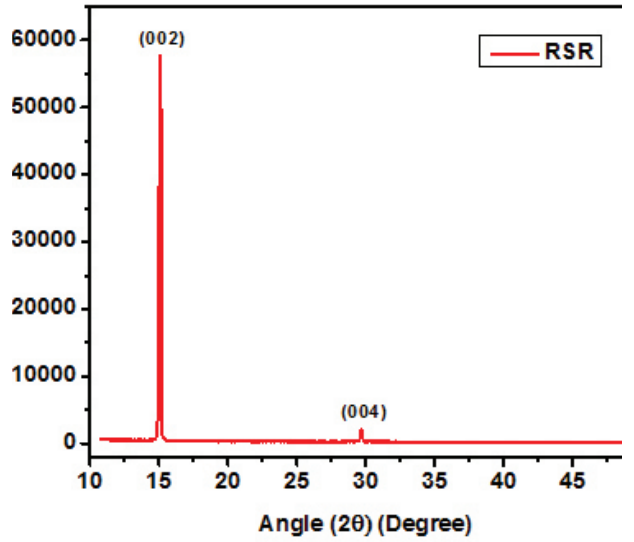


படம் 3. துகள் X-கதிர் விளிம்பு சோதனையில் 2AP4N துகள்

மேலும், சுருக முறையில் வளர்த்த படிகத்தை கிடைமட்டமாக வெட்டி அதனை ஒ-கதிர் விளிம்பு சோதனை செய்யப்பட்டது. இந்த ஆய்வு மூலம் படிகமானது (001) என்ற தளத்தில் வளர்ந்துள்ளது என்பது உறுதியாகிறது. இந்த படத்தினை படம்-4-ல் காணலாம்.

4.2 துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு

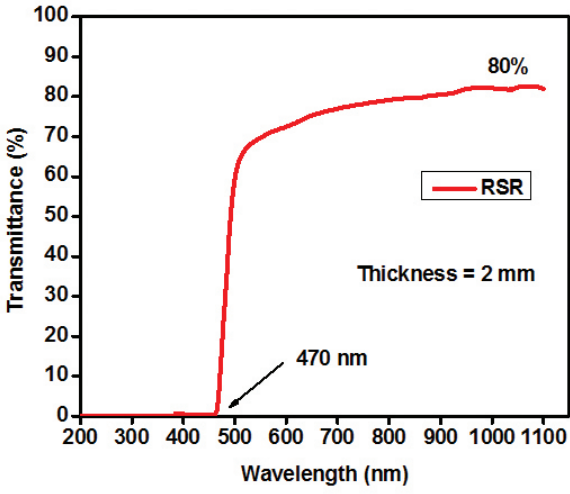
துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவை பயன்படுத்தி படிகத்தின் தரம் மற்றும் படிகத்தின் வளரும் தளத்தை அறியமுடியும். ஆய்வு செய்யப்பட்ட 2AP4N துகள் X-கதிர் விளிம்பு சோதனை படமானது CIF கொடுத்த 2AP4N துகள் ஒ-கதிர் விளிம்பு படத்துடன் பொருத்தமாக உள்ளது. இந்த படத்தினை படம்-3-ல் காணலாம். பெறப்பட்ட X-கதிர் செறிவு மிகவும் அதிகமாக உள்ளதால், வளர்க்கப்பட்ட படிகமானது நல்ல படிகத் தன்மையை கொண்டுள்ளது.



படம் 4. துகள் X-கதிர் விளிம்பு சோதனையில் 2AP4N (001) படிகம்

4.3. புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வு

வளர்ந்த நல்ல தரமான 2AP4N ஒற்றை படிகம் புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வுக்கு உட்படுத்தப்பட்டது. 1 மிமீ தடிமன் மற்றும் (001) படிகத்தளம் கொண்ட படிகமானது ஆய்விற்கு பயன்படுத்தப்பட்டது. வளர்ந்த ஒற்றை படிகமான 2AP4N ஒளியியல் ஊடுருவுத்திறன் நிறமாலை படம் 5-ல் காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 5. 2AP4N படிகத்தின் புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை

புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலையிலிருந்து, வளர்ந்த படிகமானது உற்றுநோக்கப்பட்டது. அதிலிருந்து படிகமானது முழுக் கட்புல பகுதியிலும் மற்றும் அண்மை அகச்சிவப்பு பகுதியிலும் நல்ல ஒளியியல் ஊடுருவுத்திறனை கொண்டுள்ளது. ஒளியியல் ஊடுருவுத்திறன் செறிவு குறிப்பாக ஒரு குறிப்பிட்ட அலைநீளத்தில் உட்கவர்ந்து விடும். அந்த அலைநீளமே பொருளின் வெட்டு அலைநீளம் எனப்படும். இது வளர்ந்த படிகத்திற்கு 470 nm எனக் கண்டறியப்பட்டது. σ மற்றும் π சுற்றுப்பாதையிலிருந்து எலக்ட்ரானை அடிநிலையிலிருந்து கிளர்ந்தநிலைக்கு உயர கொண்டு செல்ல ஆற்றல் தேவைப்படுகிறது. இத்தகைய ஆற்றலானது பொருளின் பட்டை இடைவெளிக்கு சமமாக இருக்கும். குறிப்பாக, உறிஞ்சும் பட்டைகளின் நிலைமாற்றமான $\pi \rightarrow \pi^*$ மற்றும் $n \rightarrow \pi^*$ உள்ளடக்கிய π - சுற்றுப்பாதை இதில் பங்கு வகிக்கிறது.

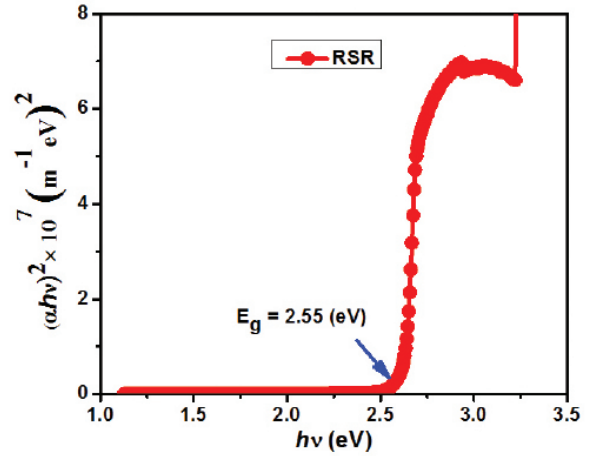
2AP4N பொருளின் உறிஞ்சுதல் குணகம் (α) என்பது படு ஒளித்துகளின் ஆற்றலைப் பொறுத்தது. α பின்வரும் தொடர்பைப் பயன்படுத்தி பல்வேறு அலைநீளங்களுக்கு கணக்கிடப்படுகிறது:

$$\alpha = \frac{2.3026}{t} \log_{10} \left(\frac{100}{T} \right) \text{ (m}^{-1}\text{)}$$

T என்பது ஒளி ஊடுருத்திறன் (%) மற்றும் t என்பது பொருளின் தடிமன் (2 மிமீ). ஒளியியல் உறிஞ்சுதல் குணகமானது (α) ஒளித்துகள் ஆற்றலுடன் சார்புடையது. இந்த ஒளித்துகளின் ஆற்றல் பட்டை அமைப்பானது ஒளியியல் ஊடுருத்திறன் வகைகளைப் படிக்க உதவுகிறது. டஃக் விதியின்படி, பொருளின் ஒளியியல் பட்டை இடைவெளியை தீர்மானிக்க உதவுகிறது [10].

$$(\alpha h\nu) = A(h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}}$$

படம் 6-ல் ஒளித்துகளின் ஆற்றல் ($h\nu$) மற்றும் $(\alpha h\nu)^2$ இடையே திட்டமிடப்பட்டுள்ளது. உறிஞ்சு குணகம் (α) வளைவின் நேர்கோட்டு பகுதியை ஒப்பீடு செய்வதன் மூலம் பொருளின் ஒளியியல் பட்டை கணக்கிடப்படுகிறது. 2AP4N படிகத்தின் கணக்கிடப்பட்ட நேரடி பட்டை இடைவெளி ஆற்றல் 2.55 eV ஆகும்.



படம் 6. ஒளியியல் பட்டை இடைவெளி நிறைமாலை

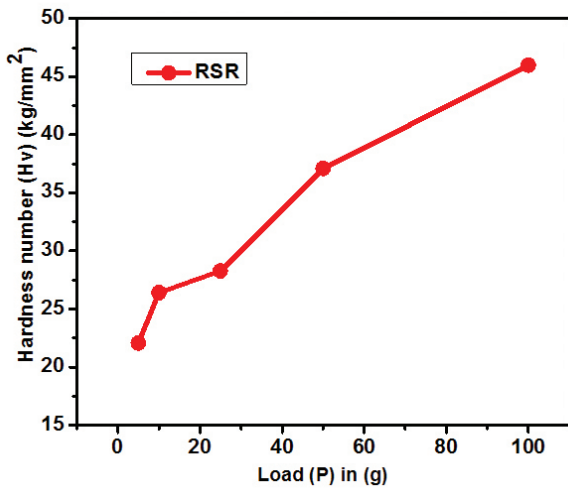
4.4. நுண் கடினத்தன்மை ஆராய்தல்

நுண் கடினத்தன்மை ஆராய்தல் மூலம் வளர்ந்த படிகமானது நல்ல படிகத்தன்மை கொண்டிருப்பதை உணரலாம் [11-12]. தற்போதைய ஆய்வில் கடினத்தன்மை பகுப்பாய்வுக்கு 2 கிராம் முதல் 100 கிராம் வரை கொடுக்கப்பட்டு, ஒவ்வொரு பளுவிற்கும் 5 விநாடி நேரம் சமமாக அளிக்கப்பட்டது. ஒவ்வொரு பளுவிற்கும் விக்ர

நுண் கடினத்தன்மையின் மதிப்பு கீழ்க்காணும் சூத்திரத்தை கொண்டு கணக்கிடப்பட்டது [12].

$$H_v = 1.854 \frac{P}{d^2} \text{ kg / mm}^2 \quad (3)$$

இதில் P என்பது செயல்முறை சார்ந்த பளு மற்றும் d என்பது மூலைவிட்ட நீளம். ஒவ்வொரு பளுவிற்குமான நுண் கடினத்தன்மை எண்கள் அளவிடப்பட்டு, அதனை படம் 7-ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது,

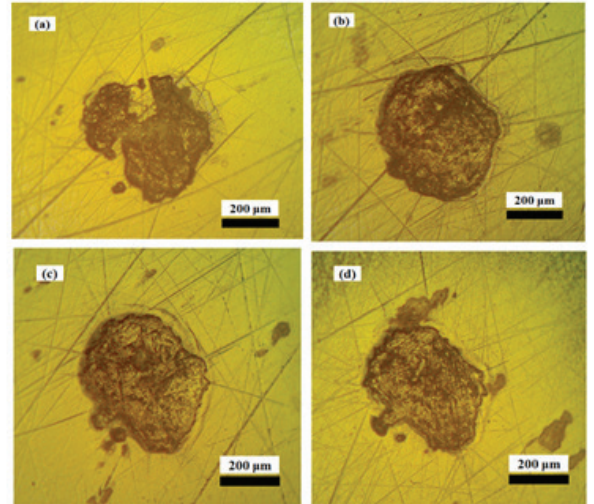


படம் 7. நுண் கடினத்தன்மை எண்கள்

4.7. லேசர் சேதம் முடுக்கம் மதிப்பு (LDT) ஆய்வு

ஒரு நடைமுறையில் லேசர் பயன்பாடுகளில், பொருளானது செலுத்தப்படுகின்ற லேசர் சக்தியை தாங்க வேண்டும். எனவே, உயர் லேசர் சேதம் முடுக்கம் (LDT) மதிப்பு நேர்சார்பிலா ஒளியியல் (NLO) மற்றும் ஒளி-மின்னியல் சாதன பயன்பாடுகளின் செயல்திறனில் மிக முக்கியமான பங்கை கொண்டுள்ளது. ஏனெனில், இது ஒளியியல் முறையில் பொருளின் செயல்திறன் வரம்பை வழங்குகிறது. எனவே, அதிக ஒளியியல் சேத சகிப்புத்தன்மை உள்ள நேர்சார்பிலா ஒளியியல் பொருட்கள் அனைத்தும் ஒளி மின்னனுச் சார்ந்த பயன்பாடுகளில் மிகவும் முக்கியமானதாகும் [13]. தற்போதைய ஆய்வில்,

2AP4N படிகத்தின் லேசர் சேதம் முடுக்கம் மதிப்பானது Nd: YAG (532 nm) லேசர் குறுக்கு வழி முறையில் (TM00), அதிர்வெண் (10 Hz) மற்றும் துடிப்பு அகலம் (7 ns) பயன்படுத்தி அளவிடப்படுகிறது. 8 மிமீ விட்டம் கொண்ட லேசர் கற்றை நன்கு பளபளப்பான 2AP4N படிக மேற்பரப்பில் குவிய நீளம் 10 செ.மீ கொண்ட ஒளிவில்லை பயன்படுத்தி செலுத்தப்பட்டது. லேசர் கதிர்வீச்சின் போது, மேற்பரப்பு சேதம் பாதிக்கப்பட்ட காட்சி உருவாக்கம் மூலம் தீர்மானிக்கப்படுகிறது மற்றும் உள்ளீடு லேசர் ஆற்றல் அடர்த்தி ஒரு மின் உணர்வான் மூலம் பதிவு செய்யப்பட்டது. 2AP4N படிகத்தின் மேற்பரப்பு சேதம் நுண்நோக்கி படமாக படம்-8 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 8. லேசர் சேதம் முடுக்கம் அமைப்பின் நுண்நோக்கிப் படங்கள்

படிகத்தின் மேற்பரப்பு சேதம் மாறுநிலை (Pd) பின்வரும் சமன்பாட்டைப் பயன்படுத்தி கணக்கிடப்பட்டது [14].

$$\text{Power density } (P_d) = \frac{E}{\tau\pi(\omega_z)^2} \quad (4)$$

இங்கு E என்பது நுண்ணிய சேதம் தோன்றிய போது லேசர் கற்றையின் உள்ளீடு துடிப்பு ஆற்றல் (20 அது), τ என்பது துடிப்பு அகலம் (7 ns) மற்றும் ω_0 என்பது குவியலில் (செ.மீ) உள்ள

கற்றை இடுப்பு சுற்றுவட்டத்தின் ஆரம் ஆகும். சுருக முறையில் வளர்ந்த 2AP4N இன் லேசர் சேதம் நுழைவு மதிப்பானது 12.5 GW / cm² என கண்டறியப்பட்டது. இதனால், உயர் ஆற்றல் லேசர் பயன்பாடுகளுக்கு 2AP4N படிமமானது பயனுள்ளதாக இருக்கும்.

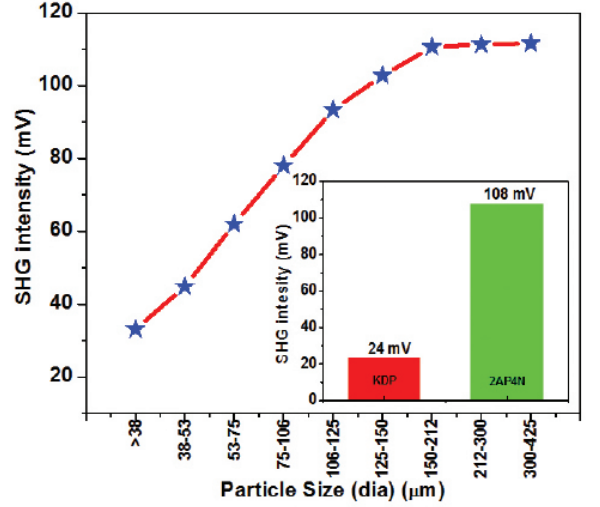
4.8. ஈரிசைவியக்க செயல்திறன் (SHG) ஆய்வு

குர்ட்ஷ்-பெர்ரி தூள் நுட்பம் என்பது பொருட்களின் ஈரிசைவியக்க செயல்திறனை (SHG) அளவிட்டு செய்வதற்கான மிக முக்கியமான கருவியாகும் [15-16]. Nd: YAG (1064 nm) லேசர் குறுக்கு வழி முறையில் (TM00), 10.8 அது ஆற்றல், அதிர்வெண் (10 Hz) மற்றும் துடிப்பு அகலம் (8 ns) பயன்படுத்தி அளவிடப்படுகிறது. வளர்ந்த ஒற்றை படிமமானது நன்கு தூள் செய்து அதனை <38, 38-53, 53-75, 75-106, 106-125, 125-150, 150-121, 212-300 மற்றும் 300-425 மைக்ரான் அளவுடைய தூள்களை துகள்-சல்லடை உதவியுடன் தனித்தனி யாக பிரிக்கப்பட்டது.

மேலும் இதனை மைக்ரோ கேபில்லரி குழாயில் (குவார்ட்ஸ் செல்) அடர்த்தி யாக நிரம்பி ஆய்விற்கு உட்படுத்தப்பட்டது. அடிப்படை அலைநீளத்தின் லேசர் (1064nm) மாதிரியில் செலுத்தி, பின்னர் பச்சை (532 nm) உமிழ்வு கண்டறியப்பட்டது. உருவாக்கப்பட்ட ஈரிசைவியக்க செயல்திறனின் மதிப்பானது ஒவ்வொரு துகள்களாலும் உருவாக்கப்படும் ஈரிசைவியக்க செயல்திறனின் மொத்த தொகைக்கு சமம். மாதிரியிலிருந்து பச்சை உமிழ்வினை (532nm) ஒற்றை நிற ஒளி உணர்வானை பயன்படுத்தி சேகரிக்கப்பட்டது. சேகரிக்கப்பட்ட படமானது (படம்-9) செயல்திறனின் மதிப்பிற்கும் மற்றும் தூள் அளவிற்கும் வரையப்பட்டுள்ளது. இதன்மூலம், செயல்திறனின் மதிப்பானது தூள் அளவினை பொறுத்து அதிகரித்து, பின்பு செறிவு தளத்தை அடைகிறது.

இவ்வாறு செறிவு தளத்தை அடைந்ததால், 2AP4N கட்ட-பொருந்தும் அடைவதைக் குறிக்கிறது. அளவிடப்பட்ட 2AP4N ஈரிசைவியக்க செயல்திறனின் மதிப்பானது KDP படிமத்துடன்

ஒப்பிடும்போது 4.5 மடங்கு அதிகமாக உள்ளது. எனவே, அதிக ஈரிசைவியக்க செயல்திறனின் மதிப்பு மற்றும் கட்ட-பொருந்தும் பண்புகள் கொண்டிருப்பதால், 2AP4N படிம ஈரிசைவியக்க செயல்திறன் (SHG) கருவிக்கு மிகவும் பொருத்தமாக இருக்கும்.



படம் 9. துகளை பொருத்த ஈரிசைவியக்க செறிவு

5. முடிவுரை

நல்ல தரமான கரிம நேர்ச்சார்பிலா ஒளியியல் ஒற்றை படிமமான 2-அமினோபிரிடனியும் 4-நைட்ரோபீனாலேட் 4-நைட்ரோபீனால் (2AP4N) புதிய படிம வளர்ப்பு நுட்பமான “சுழல் சங்கரநாராயணன்-இராமசாமி (RSR) முறை மூலம் வெற்றிகரமாக (001) திசையில் வளர்க்கப்பட்டது. வளர்ந்த படிமமானது ஒற்றை படிம X-கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்விற்கு உட்படுத்தப்பட்டது. இதன் மூலம் படிமமானது செஞ்சாய்சதுரம் அமைப்பு மற்றும் Pna21 இடக்குழு கொண்டுள்ளது என்பதை உறுதிப்படுத்துகிறது.

துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவை பயன்படுத்தி படிமத்தின் தரம் மற்றும் படிமத்தின் வளரும் திசை (001) என அறியமுடிகிறது. புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வு மூலம் ஒற்றை படிமத்தின் ஒளியியல் தரம் கண்டறியப்பட்டது. படிமத்தின்

நுண் கடினத்தன்மை ஆராயப்பட்டது. Nd:YAG லேசரை (532 nm) பயன்படுத்தி வளர்ந்த படிகத்தின் லேசர் மேற்பரப்பு சேதச் சிதைவு மதிப்பு அளவிடப்பட்டது.

ஒற்றை படிகத்தின் ஈரிசைவியக்க செயல் திறன் (SHG) குர்ட்ஷ்-பெர்ரி தூள் நுட்பத்தைப் பயன்படுத்தி வெவ்வேறு துகள் அளவைக் கொண்டு பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது. ஈரிசை வியக்க செயல்திறனின் மதிப்பானது KDP

படிகத்துடன் ஒப்பிடும்போது 4.5 மடங்கு அதிகமாக உள்ளது. சிறந்த ஒளியியல் மற்றும் இயற்பியல் பண்புகளுடன் ஈரிசைவியக்க செயல் திறன் கட்ட-பொருந்தும் அடைவதால், உயர் செயல்திறன் கொண்ட நேர்சார்பிலா ஒளியியல் சாதனங்கள் உருவாக்க முடியும்.

அங்கீகாரங்கள் :

இந்த வேலை BRNS திட்டத்தால் ஆதரிக்கப் பட்டது (குறிப்பு 34/14/06/2016-BRNS / 34032).

மேற்கோள்:

- [1] W. Zhang, J. Yao, Y. S. Zhao, Organic Micro/Nanoscale Lasers, Acc. Chem. Res. 49 (2016) 1691-1700.
- [2] L. Zaitseva, L. Carman, Rapid growth of KDP-type crystals, Prog. Cryst. Growth Charact. 43 (2001) 1-118.
- [3] P. N. Prasad, D. J. Wollians, Introduction to Nonlinear Optical Effects in Molecules and Polymers, Wiley-Interscience, New York, 1991.
- [4] M. J. Prakash, T. P. Radhakrishnan, Cryst. Growth Des., 2005, 5, 721-725.
- [5] P. Karuppasamy, T. Kamalesh, Muthu Senthil Pandian, P. Ramasamy, Sunil Verma, J. Cryst. Growth, 518, (2019) 59-72.
- [6] K. Sankaranarayanan, P. Ramasamy, J. Cryst. Growth, 280 (2005) 467-473.
- [7] N. Balamurugan, P. Ramasamy, Cryst. Growth Des. 6 (2006) 1642-1644.
- [8] P. Rajesh, P. Ramasamy, G. Bhagavannarayana, B. Kumar, Curr. Appl. Phys. 10 (2010) 1221-1226.
- [9] S. K. Sharma, S. Verma, Y. Singh, K. S. Bartwal, M. K. Tiwari, G. S. Lodha, G. Bhagavannarayana, Opt. Mater. 46 (2015) 329-338.
- [10] J. Tauc, R. Grigorovici, A. Vancu, Phys. Status Solidi. B, 1996, 15, 627-637.
- [11] S. Karan, S. P. S. Gupta, Mater. Sci. Eng. A. 398 (2005) 198-203.
- [12] P. Karuppasamy, V. Sivasubramani, M. Senthil Pandian, P. Ramasamy, RSC Adv. 6 (2016) 109105-109123.
- [13] G. H. Sun, G. H. Zhang, Z. H. Sun, X. Q. Wang, D. Xu, Mater. Chem. Phys., 2011, 127, 265-270.
- [14] R. M. Wood, Laser-Induced Damage of Optical Materials, Institute of Physics Publishing, Dirac House, Bristol, UK, 2003.
- [15] G. Bhagavannarayana, S. Parthiban, S. Meenakshisundaram, Cryst. Growth Des. 8 (2008) 446-451.
- [16] S. K. Kurtz, T. T. Perry, J. App. Physics. 39 (1968) 3798.

காஃபினை பிரித்தெடுத்து அதன் மூலக்கூறு அமைப்பு மற்றும் நிறமாலை பண்புகளை அடர்த்தி செயல்பாட்டு முறைகளின் மூலம் விளக்குதல்

பா.ராஜ்குமார்¹, ச.செல்வராஜ்¹, கே.திருநாவுக்கராசு¹, ந.சாரதா தேவி²,
சே .குணசேகரன்⁴, சு குமரேசன்^{3,1 *}

1. இயற்பியல் ஆராய்ச்சி துறை, 2. வேதியியல் துறை, அறிஞர் அண்ணா அரசு கலைக் கல்லூரி, செய்யார் - 604 407.

3. இயற்பியல் துறை, அரசு கலைக் கல்லூரி, ஸ்டோன் ஹவுஸ் ஹில், உதகமண்டலம், நீலகிரி - 643 002.

4. ஸெயின்ட் பீட்டர் பல்கலைக்கழகம், ஆவடி, சென்னை - 600 054

* மின்னஞ்சல் : yeskay72@gmail.com

ஆய்வுச்சுருக்கம்

இந்தியாவின் தமிழ்நாட்டில் உள்ள நீலகிரியின் பல்வேறு பகுதிகளிலிருந்து தினசரி பயன்படுத்தப்படும் தேநீர் பானத்திலிருந்து காஃபின் என்ற தூண்டுதல் மருந்து எடுக்கப்பட்டுள்ளது. தேயிலை கேடசின்களின் வேதியியல் மாற்றங்கள், வெப்பநிலை, பி.எச், ஆக்ஸிஜன் இருப்பு, உலோக அயனிகளின் இருப்பு மற்றும் சேர்க்கப்பட்ட பொருட்கள் போன்ற காரணிகள் தேயிலையின் தரத்தை நிர்ணயிக்கின்றன. தேயிலையின் தரமானது அதன் சிறந்த சாறுகளுக்கு வண்ண சோதனை, ஒளிவிலகல் குறியீட்டு சோதனை மற்றும் பொருட்களின் மொத்த கரையக்கூடிய திடப்பொருட்கள் சோதனை மூலம் BIS தரங்களைப் பயன்படுத்தி சோதிக்கப்படுகிறது. பிரித்தெடுக்கப்பட்ட காஃபினுக்கு அடிப்படை பகுப்பாய்வு, FT-IR, UV, NMR மற்றும் மூலக்கூறு நிறமாலை ஆகியவை பதிவு செய்யப்பட்டன. 6-31 ஜி (டி, பி) அடிப்படை தொகுப்புகளைப் பயன்படுத்துவதன் மூலம் அடர்த்தி செயல்பாட்டுக் கோட்பாடு (டிஎஃப்டி) முறைகளைப் பயன்படுத்தி இயல்பு நிலையில் உள்ள மூலக்கூறின் கட்டமைப்பு மற்றும் நிறமாலை தரவு கணக்கிடப்பட்டுள்ளது. சிகிச்சை முகவர்களின் மைய நரம்பு மண்டலத்தின் பிணைப்பு ஆற்றல் மற்றும் பிணைப்பு தளத்தை அடையாளம் காண மூலக்கூறு பிணைத்தல் செய்யப்பட்டது. அடினோசினின் வளர்சிதை மாற்றத்தில் மாற்றத்திற்கான பிணைப்பு, புரதத்துடன் காஃபின் பங்கு மற்றும் அதன் வழிமுறை ஆகியவை ஆராயப்பட்டது.

முக்கிய வார்த்தைகள் : காஃபின்; CNH; FTIR; புற ஊதா; என்எம்ஆர்; மூலக்கூறு நிறை; மூலக்கூறு பிணைத்தல்

1. முன்னுரை

தேநீர் உலகில் மிகவும் பரவலாக நுகரப்படும் பானங்களில் ஒன்றாகும், மேலும் இது ஒரு பிரபல பானமாக தண்ணீருக்கு அடுத்தபடியாக உள்ளது. கேமல்லியா சினென்சிஸின் இலைகளிலிருந்து வெவ்வேறு உற்பத்தி செயல்முறைகளால் 300-க்கும் மேற்பட்ட வெவ்வேறு வகையான தேநீர்

தயாரிக்கப்படுகிறது [1]. தேயிலை சாற்றின் முக்கிய அங்கமானது பலவிதமான வேதிப் பொருட்களின் கலவையைக் கொண்டிருக்கும். பெரும்பாலும் அவற்றில் ஒன்று அல்லது ஒருசில மட்டுமே சாற்றின் செயல்பாட்டிற்கு காரணமாகின்றன. பல தசாப்தங்களாக இத்தகைய சாறுகள் அவற்றின் இயற்கை மூலங்களிலிருந்து

நேரடியாகப் பயன்படுத்தப்பட்டன [2-5]. இந்த நடைமுறையில் பல குறைபாடுகள் உள்ளன. ஏனெனில் சாற்றின் கலவை அவ்வப்போது மாறுபடும், மேலும் இது இயற்கையிலிருந்து கிடைக்கும் தன்மையைப் பொறுத்தது.

தேநீரில் இருந்து அறியப்பட்ட சிறந்த சாறு காஃபின் ஆகும். காஃபின் (1, 3, 7 டிரைமெதில் சாந்தைன்) என்பது தேநீர் மற்றும் காபியில் உள்ள ஒரு ஆல்கலாய்டு ஆகும், மேலும் சக்லெட், கோலா போன்ற குளிர்்பானங்களிலும் இது உள்ளது. காஃபினின் வேதியியல் சூத்திரம் $C_8H_{10}N_4O_2$ ஆகும். தூய்மையான காஃபின் மணமற்ற, வெள்ளை தூளாக உள்ளது. இதன் மூலக்கூறு எடை 194.19 கிராம், உருகும் புள்ளி $236^\circ C$ பதங்கமாதல் புள்ளி $178^\circ C$ மற்றும் pH மதிப்பு 6 முதல் 9 ஆகும். வேதியியல் ரீதியாக, காபி என்பது மற்ற இரசாயனங்களுடன் காஃபினை முக்கிய மூலப்பொருளாகக் கொண்ட மிகவும் சிக்கலான நுகர்பொருட்களில் ஒன்றாகும்.

காஃபின் உட்கொள்வதன் மூலம் இரத்த அழுத்தம் அதிகரித்தல், சீரம் கொழுப்பு அமில அளவு அதிகரித்தல், பிளாஸ்மா கேட்கோலமைன் அளவு அதிகரித்தல், சிறுநீர் உற்பத்தி அதிகரித்தல் மற்றும் இரைப்பை அமில சுரப்பு அதிகரித்தல் ஆகிய உடலியல் விளைவுகளில் ஏற்படுகின்றன. இருப்பினும், காஃபினின் அதிகப்படியான பயன்பாடு போதைக்கு வழிவகுப்பதால் ஆரோக்கியத்திற்கு ஆபத்தானது, இதனால் கட்டிகள், மார்பக புற்றுநோய், கரோனரி நோய் மற்றும் மாரடைப்பு போன்ற மருத்துவ பிரச்சினைகள் ஏற்படுகின்றன. இருப்பினும், புகைபிடித்தல் மற்றும் ஆல்கஹால் [6-14] போன்ற பிற ஆபத்து காரணிகள் இல்லாத நிலையில், காஃபின் மிதமான பயன் பாட்டின் நீண்டகால சுகாதார விளைவுகள் எந்தவொரு மருத்துவ சிக்கலுடனும் தொடர்பு படுத்தப்படவில்லை.

இந்திய தர சான்று நிலையம் (பிஐஎஸ்) தரும் காஃபின் உள்ளடக்கம் மற்றும் வண்ணத்தின் அளவு குறித்த தேநீரின் தரத்தை அடையாளம் காணலாம். குணசேகரன் மற்றும் பலர், [15] சில சாந்தைன் மற்றும் அதன் வழித்தோன்றல்களில் செங்கொள ஒருங்கிணைப்பு வழிமுறை (NCA)

பயன்படுத்தி காஃபினின் முலகூறு அதிர்வுகளை பதிவு செய்துள்ளனர். அதைத் தொடர்ந்து மூலக்கூறு அமைப்பு மற்றும் சாந்தைனின் அதிர்வு அதிர்வெண்கள், DFT முறைகளைப் பயன்படுத்தி உள்ளனர் [16]. நிறமாலை மற்றும் DFT முறைகளைப் பயன்படுத்தி தேயிலை தர சோதனை மற்றும் காஃபின் கட்டமைப்பு உறுதிப்படுத்தல் ஆகியவற்றை பற்றி இதுவரை எந்த ஆய்வும் சமர்ப்பிக்கப்படவில்லை என்பது ஆராய்ந்தறிந்ததால் புரிந்து கொள்ளப்படுகிறது.

எனவே, இந்த ஆய்வறிக்கை காஃபினின் சாறு அளவு பற்றிய தேநீரின் தரத்தை பற்றி விளக்குவதை நோக்கமாகக் கொண்டுள்ளது. மேலும் ஒளியியல் (ஆப்டிகல்), நிறமாலை மற்றும் DFT முறைகளைப் பயன்படுத்தி அதன் கட்டமைப்பையும் உறுதிப்படுத்தி தெளிவாக விளக்கப்பட்டுள்ளது.

2. தீர்மான பொருட்கள் மற்றும் செய்முறைகள்

தேயிலைக்கான கேமல்லியா சினென்சிஸ் ஒத்த பொருளின் தாவரப் பொருட்கள் நீலகிரி மாவட்டத்திலிருந்து சேகரிக்கப்பட்டன, அங்கு தேநீர் சாகுபடி பொருளாதார முக்கியத்துவம் வாய்ந்ததாக உள்ளது. நன்கு வளர்ந்த செடியிலிருந்து சிறந்த தேயிலை இலைகள் ஊட்டி, குன்னூர், கூடலூர், கோத்தகிரி போன்ற மாவட்டத்தின் பல்வேறு பகுதிகளிலிருந்து சேகரிக்கப்பட்டன. தேயிலை இலைகள் 45 நாட்களுக்கு நன்கு உலர சூரிய ஒளியில் வைக்கப்பட்டது. உலர்ந்த தாவர பொருள் இறுதியாக தேயிலை தூளாக அரைக்கப்பட்டது.

கேபிஆர் பெல்லட் நுட்பத்தைப் பயன்படுத்தி அறை வெப்பநிலையில் $4000-400$ செ.மீ⁻¹ பிராந்தியத்தில் பெர்கின் எல்மர் நிறமாலைமானி பயன்படுத்தி எஃப்.டி.ஐ.ஆர் நிறமாலை பதிவு செய்யப்பட்டது மற்றும் ஒவ்வொரு ஐ.ஆர் நிறமாலையும் 10 ஸ்கேன்களில் 0.5 செ.மீ⁻¹ தீர்மானத்தில் பெறப்பட்டது. பின்னர் பட்டை ஒளிச்செறிவு பரிமாற்றத்தில் வெளிப்படுத்தப்பட்டன (%). தமிழ்நாட்டின் உதக மண்டலம், ஜே.எஸ்.எஸ். மருந்தியல் கல்லூரியில் எஃப்.டி.ஐ.ஆர் நிறமாலை பதிவுக்காக காஃபின்

தூள் மாதிரிகள் வழங்கப்பட்டன. சென்னை செயின்ட் பீட்டர் பல்கலைக்கழகத்தில் டிஃப்ரூஸ் பிரதிபலிப்பு முறையைப் பயன்படுத்தி புறஊதா-கட்புலனாகும் நிறமாலைகள் பதிவு செய்யப்பட்டன. என்.எம்.ஆர் சோதனைகள் ப்ரூக்கர் அவான்ஸ் III500 மெகா ஹெர்ட்ஸில் 300 கே. இல் மேற்கொள்ளப்பட்டன. இந்த கலவை முறையே கார்பன் மற்றும் புரோட்டான் என்.எம்.ஆருக்கு CDC13 மற்றும் D2O ஆகியவற்றில் கரைக்கப்பட்டது. 1 H மற்றும் 13 C நிறமாலைகள் டெட்ராமெதில்சிலேன் (டி.எம். எஸ்) உடன் ஒப்பிடும்போது ஒரு மில்லியனுக்கு ஒரு பாகத்தில் வேதியியல் மாற்றங்கள் பதிவாகியுள்ளன. 1 H மற்றும் 13 C நிறமாலை முறையே 400 மற்றும் 100 மெகா ஹெர்ட்ஸ் அடிப்படை அதிர்வெண்ணில் பெறப்பட்டன. என்.எம்.ஆர் மற்றும் மூலக்கூறுநிறை நிறமாலை ஆகியவை சென்னை, இந்திய தொழில்நுட்ப நிறுவனத்தில்

பதிவு செய்யப்பட்டன.

2.1. காஃபின் பிரித்தெடுத்தல்

காரத்தின் பி.எச்.ஐ பெறுவதற்கு ஒவ்வொரு தொகுப்பிலிருந்தும் 50 கிராம் தேயிலை தூள் 200 மில்லி தண்ணீர் மற்றும் 5 கிராம் மெக்னீசியம் ஆக்சைடுடன் சூடேற்றப்பட்டது. பின்னர் அது 2 மணி நேரம் சூடாக்கப்பட்டு வடிகட்டப்பட்டது. வடிகட்டிய பின்னர் தொடர் முறை மூலம் அடுத்தடுத்த குளோரோஃபார்முடன் பிரித்தெடுக்கப்பட்டது. குளோரோஃபார்ம் கரிம அடுக்கு பிரிக்கப்பட்டு பின்னர் கச்சா காஃபின் பெற வறட்சிநிலை வரும்வரை ஆவியாக்கப்பட்டது. தூய்மையான கச்சா காஃபின் பெற மூன்று முறை கழுவப்பட்டு உலர்த்தப்பட்டது. ஒவ்வொரு மாதிரிக்கும் காஃபின் சாற்றின் அளவு அட்டவணை 1 இல் பட்டியலிடப்பட்டுள்ளது.

அட்டவணை 1 காஃபின் விளைச்சலின் அளவு

Sample	Temperature ° C	Range (mg)
OOTY	19 ° C	79 mg
COONOOR	20 ° C	138 mg
GUDULAR	22 ° C	73.4 mg
KOTHAGIRI	19 ° C	40 mg

2.2. நிறம் மற்றும் மொத்த கரையக்கூடிய திடப்பொருள்கள்

காஃபின் பிரித்தெடுப்பதற்கு முன்பு, தேயிலை தூளிலிருந்து தேயிலை உட் செலுத்துதல் நான்கு மாதிரிகளுக்கும் செய்யப்பட்டது. 10 கிராம் தேயிலை இலைகளை 100 மில்லி சுத்திகரிக்கப்பட்ட தண்ணீரில் காய்ச்சி 80°C-ல் சூடாக்கிய பின்னர் 1 மணிநேரம் தடையின்றி வைக்கப்பட்டது [17]. ஒரு மணி

நேரத்திற்குப் பிறகு, நீரில் கரைந்த மாதிரிகள், கரைக்கப்படாத தேயிலை தூளை வடிகட்டுவதன் மூலம் அளவிடப்பட்டன மற்றும் கரைக்கப்படாத தேயிலை தூளின் எடை சதவீதம் 4%-ஐ தாண்டாது பார்த்துக்கொள்ளப்பட்டது. தேயிலை சாறுகளில் இருந்து சிறந்த தூள் தயாரிக்க அவை வண்ண சோதனைக்கு உட்படுத்தப்பட்டன. எஸ்.டி.பி-யில் ரிஃப்ராக்டோமீட்டரைப் பயன்படுத்தி வண்ண சோதனைகள் செய்யப்பட்டன. இச்சோதனை அவற்றின் நிறம் செம்பழுப்பு

நிறமாக இருப்பதைக் காட்டுகிறது. தேநீரில் உள்ள தூளின் காய்ச்சும் அளவு மற்றும் வண்ணத்தால் தேயிலையின் தரமும் தீர்மானிக்கப்படுகிறது. தேயிலை சாற்றின் ஒளிவிலகல் குறியீட்டை

அளவிடுவது வண்ண சோதனைக்கு சமமாக ஆதரிக்கப்படுகிறது. இவை அனைத்தும் BIS தரங்களுடன் அட்டவணை 2 இல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது.

அட்டவணை 2 வண்ண அட்டவணை மற்றும் ஒளிவிலகல் குறியீட்டு சோதனை

SAMPLE	RI (Lab)	BIS	Color Index Test	TDS (10 ml)(STP)
OOTY	1.39			21%
COONOOR	1.39	1.36~1.39	Best refraction	27%
GUDULAR	1.39	@STP	at Tanner Brown	21.4%
KOTHAGIRI	1.39			22.6%

RI – Refractive Index at Laboratory, BIS – Burea of Indian Standards,

TDS – Total Dissolvable Solids

2.3. கணக்கீட்டு விவரங்கள்

பிரித்தெடுக்கப்பட்ட காஃபின் கட்டமைப்பு தூய காஃபின் மூலக்கூறின் கட்டமைப்போடு ஒப்பிடப்பட்டது. தற்போதைய ஆய்வில் காஃபின் மூலக்கூறில் நடத்தப்பட்ட முழு கணக்கீடுகளும் காஸியன் 03W தொகுப்பு திட்டத்தில், சாய்வு வடிவியல் தேர்வுமுறை [18] ஐப் பயன்படுத்தி நிகழ்த்தப்பட்டன. அடர்த்தி செயல்பாட்டுக் கோட்பாட்டின் (டிஎஃப்டி) 6-31 ஐ அடிப்படை தொகுப்பு செயல்பாடுகளுடன் லீ யாங்-பார் தொடர்பு (B3LYP) முறையுடன் [19-20] இணைந்து பெக்கின் மூன்று அளவுரு கலப்பின செயல்பாட்டையும் அடர்த்தி சார்பின் சார்பு செயல்பாட்டுக் கோட்பாட்டையும் பயன்படுத்தி அதன் வடிவம் மேம்படுத்தப்பட்டது. அனைத்து நிலையான புள்ளி களையும் குறைந்த புள்ளிகளாக வகைப்படுத்த, DFT மட்டங்களில் அதிர்வு அதிர்வெண் கணக்கீடுகளில் உகந்த கட்டமைப்பு அளவுருக்கள் பயன்படுத்தப்பட்டன.

காஃபின் அதிர்வுறும் சராசரி அணு நிலைகள் ஹார்மோனிக் அதிர்வு அதிர்வெண் கணக்கீடுகளுக்குப் பயன்படுத்தப்பட்டன, இதன் விளைவாக ஐஆர் அதிர்வெண்கள் ஒளிச்செறிவுடன் சேர்ந்துள்ளன. இறுதியாக, கணக்கிடப்பட்ட இயல்பான பயன்முறை அதிர்வு அதிர்வெண்கள், புள்ளிவிவர இயக்கவியல் மூலம் வெப்ப இயக்கவியல் பண்புகளை வழங்குகின்றன.

3. ஆராய்ச்சி முடிவுகள் மற்றும் அழைப்பற்றிய விளக்கங்கள்

3.1. அடிப்படை பகுப்பாய்வு

அடிப்படை பகுப்பாய்வு (சி.என்.எச்) என்பது ஒரு பகுப்பாய்வு நுட்பமாகும், இது சாற்றில் உள்ள தனிமங்களின் செறிவுகளை அளவிடுகிறது. மேலும் சாற்றில் பிரித்தெடுக்கப்பட்ட காஃபின் கூறுகள் இருப்பதையும் மற்றும் அதன் செறிவைப்பற்றி தெரிந்து கொள்வதற்கும்

சி.என்.எச் சோதனைக்கு உட்படுத்தப்படுகிறது. சி.என்.எச் சோதனையின் முடிவு அட்டவணை 3 இல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது. மாதிரியின்

மூலக்கூறு எடை 194.108 கிராம் / மோல் என மதிப்பிடப்பட்டுள்ளது, இது காஃபின் மூலக்கூறு சூத்திரத்துடன் உடன்படுகிறது. எனவே இது காஃபின் மாதிரி ஆக இருக்க வாய்ப்புள்ளது.

அட்டவணை 3 அடிப்படை பகுப்பாய்வு - சி.என்.எச் சோதனை

Elements (g)	Weight Proportion	%
49.5 g Carbon	49.5/12	4.22
5.2 g Hydrogen	5.2/1	5.2
28.8 g Nitrogen	28.8/14	2.04
16.6 g Oxygen	16.6/16	1.01

3.2. காஃபினின் மூலக்கூறு வடிவியல்

6-31G (d, p) அடிப்படை தொகுப்போடு DFT-B3LYP அளவுகளால் கணக்கிடப்பட்ட காஃபின் உகந்த கட்டமைப்பு அளவுருக்கள் அட்டவணை 4 இல் பட்டியலிடப்பட்டுள்ளன மற்றும் படம் 2 இல் கொடுக்கப்பட்டுள்ள அணு எண் திட்டத்திற்கு இணங்க ஏற்கனவே அறிவிக்கப்பட்ட ஆராய்ச்சி முடிவுகளுடன் கணக்கிடப்பட்ட அளவுருக்கள் உடன்பாட்டில் உள்ளன [16]. Cs புள்ளி குழு சமச்சீர்மை மற்றும் மிகவும்

நிலையான உறுதிப்படுத்தியைப் பயன்படுத்தி பயன்படுத்தப்படும் கணக்கீடுகள் காஃபின் C1 புள்ளி குழு சமச்சீர்நிலையில் இருப்பதை காட்டுகிறது.

குழு கோட்பாட்டின் பார்வையில், நிலையான உறுதிப்படுத்தியின் கீழ் கணக்கிடும்போது ஒரு காஃபின் மூலக்கூறுக்கு, 25 நீட்சி ஆயத் தொகுப்புகள், 43 வளைக்கும் ஆயத்தொகுப்புகள் மற்றும் 13 முறுக்கு ஆயத்தொகுப்புகள் இருப்பது தெரிந்து கொள்ளப்பட்டது.

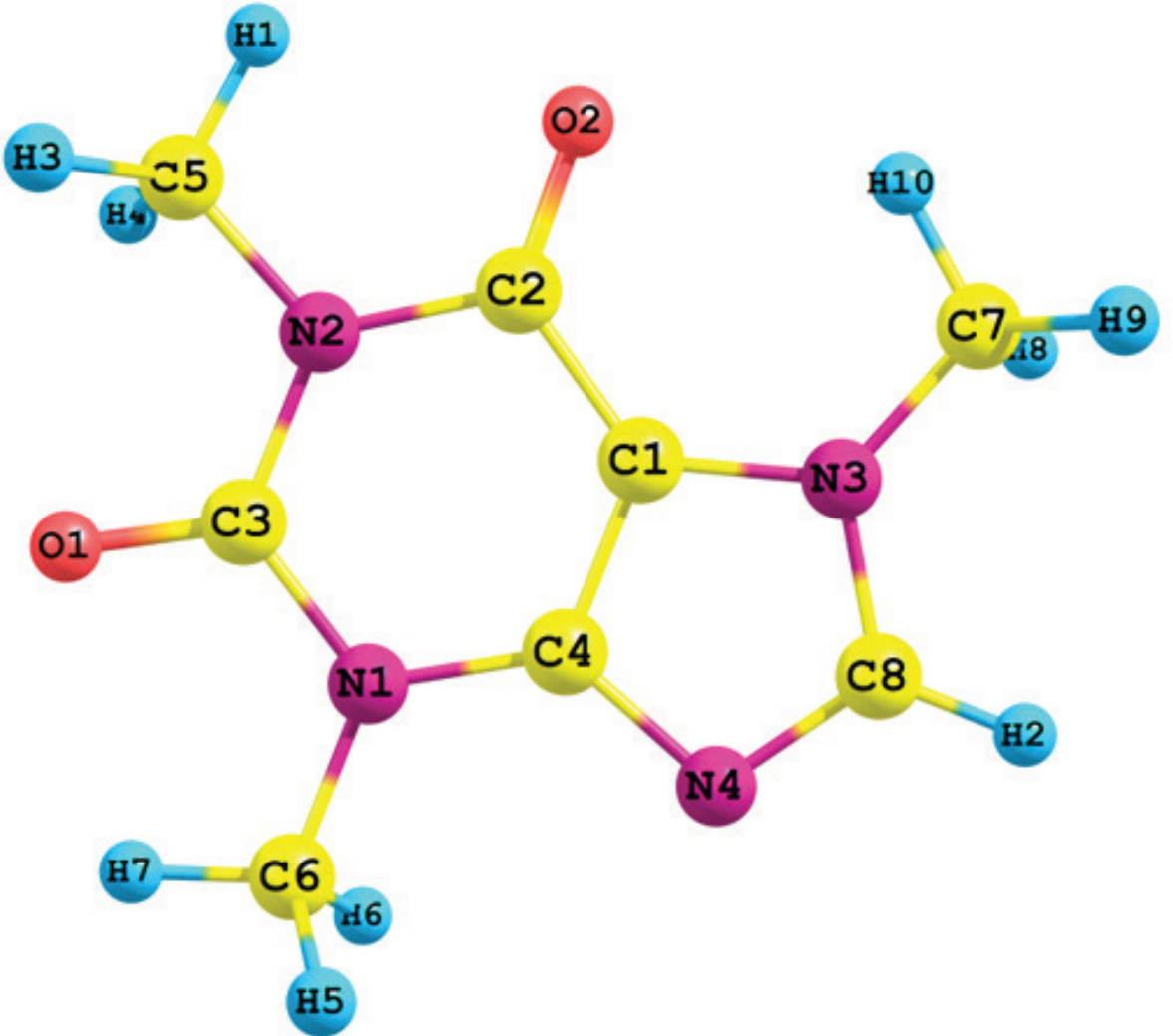
**அட்டவணை 4 காஃபின் பிணைப்பு நீளம் (Å) மற்றும் பிணைப்பு (°)
ஆகியவற்றில் உகந்த வடிவியல் அளவுருக்கள்**

Parameters	Optimized at B3LYP/6-31G(d,p)	Parameters	Optimized at B3LYP/6-31G(d,p)
(C ₁ -N ₂)	1.46	(N ₂ -C ₁ -H ₁₅)	110.2
(C ₁ -H ₁₅)	1.092	(N ₂ -C ₁ -H ₁₆)	108.2
(C ₁ -H ₁₆)	1.091	(N ₂ -C ₁ -H ₁₇)	110.2
(C ₁ -H ₁₇)	1.092	(C ₁ -N ₂ -C ₃)	127.3
(N ₂ -C ₃)	1.356	(C ₁ -N ₂ -C ₆)	127
(N ₂ -C ₆)	1.389	(H ₁₅ -C ₁ -H ₁₆)	109.8
(C ₃ -N ₄)	1.332	(H ₁₅ -C ₁ -H ₁₇)	108.5
(C ₃ -H ₁₈)	1.081	(H ₁₆ -C ₁ -H ₁₇)	109.8
(N ₄ -C ₅)	1.359	(C ₃ -N ₂ -C ₆)	105.7
(C ₅ -C ₆)	1.384	(N ₂ -C ₃ -N ₄)	113.7
(C ₅ -N ₁₃)	1.376	(N ₂ -C ₃ -H ₁₈)	121.8
(C ₆ -C ₇)	1.433	(N ₂ -C ₆ -C ₅)	105.2
(C ₇ -O ₈)	1.231	(N ₂ -C ₆ -C ₇)	131.3
(C ₇ -N ₉)	1.417	(N ₄ -C ₃ -H ₁₈)	124.5
(N ₉ -C ₁₀)	1.469	(C ₃ -N ₄ -C ₅)	103.7
(H ₂₃ -C ₁₄ -H ₂₄)	110.3	(N ₄ -C ₅ -C ₆)	111.7
(C ₇ -N ₉ -C ₁₀)	118.2	(N ₄ -C ₅ -N ₁₃)	126.9
(C ₇ -N ₉ -C ₁₁)	126.6	(C ₆ -C ₅ -N ₁₃)	121.4
(C ₁₀ -N ₉ -C ₁₁)	115.2	(C ₅ -C ₆ -C ₇)	123.6
(N ₉ -C ₁₀ -H ₁₉)	109.9	(C ₅ -N ₁₃ -C ₁₁)	119.6
(N ₉ -C ₁₀ -H ₂₀)	107.4	(C ₅ -N ₁₃ -C ₁₄)	122
(N ₉ -C ₁₀ -H ₂₁)	109.9	(C ₆ -C ₇ -O ₈)	126.2
(N ₉ -C ₁₁ -O ₁₂)	121.2	(C ₆ -C ₇ -N ₉)	111.3
(N ₉ -C ₁₁ -N ₁₃)	117.4	(O ₈ -C ₇ -N ₉)	122.4
(H ₁₉ -C ₁₀ -H ₂₀)	110.6	(C ₇ -O ₈ -H ₂₀)	84.8
(H ₁₉ -C ₁₀ -H ₂₁)	108.4	(C ₁₁ -N ₁₃ -C ₁₄)	118.3
(H ₂₀ -C ₁₀ -H ₂₁)	110.6	(N ₁₃ -C ₁₄ -H ₂₂)	110
(C ₁₀ -H ₂₀ -O ₈)	107.2	(N ₁₃ -C ₁₄ -H ₂₃)	110

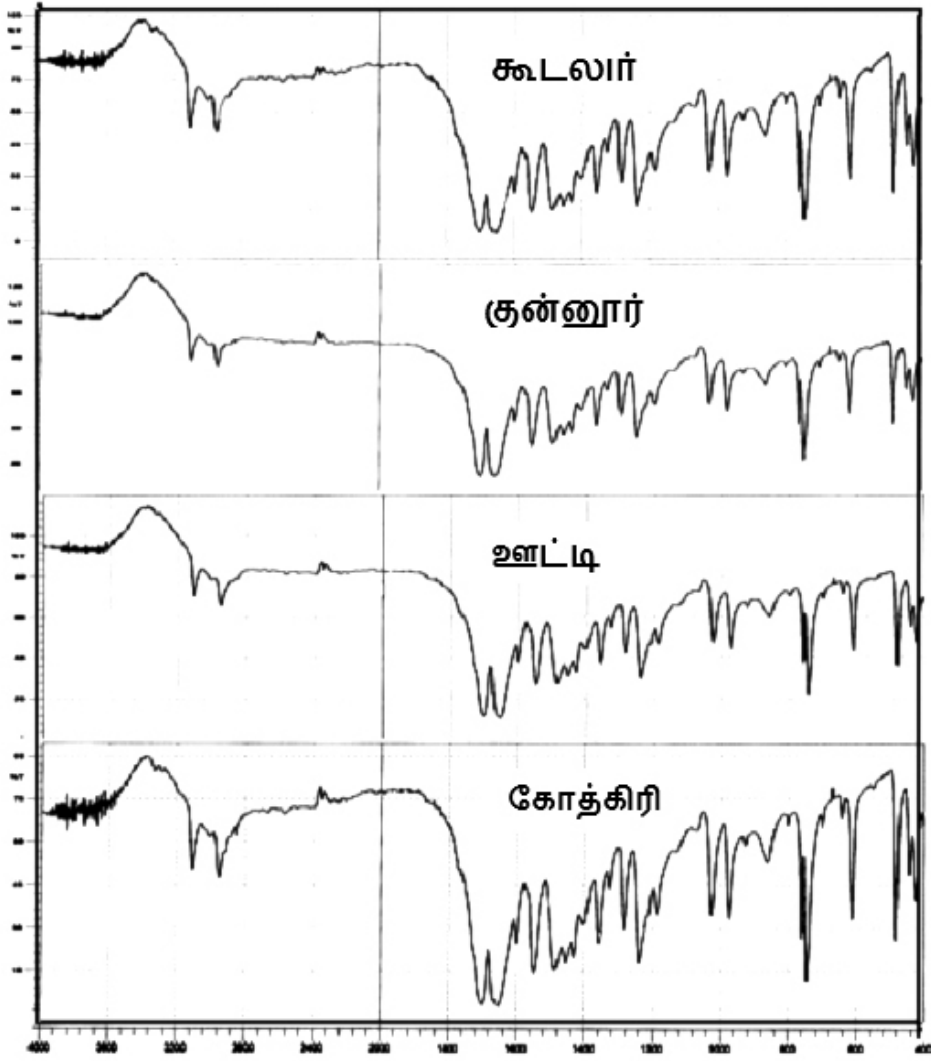
4. காஃபின் அதிர்வு பகுப்பாய்வு

B3LYP / 6-311G (d, p) கணக்கீட்டின் மட்டத்தில் காஃபினின் அதிர்வு அதிர்வெண்களைக் கணக்கிட உகந்த கட்டமைப்பு அளவுருக்கள் பயன்படுத்தப்பட்டன. காஃபினின் பிரித்தெடுக்கப்பட்ட அனைத்து மாதிரிகளின் ஃபிரியர் மாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலைகள் (FT-IR), படம் 1 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது.

காஃபினுக்கான விரிவான பட்டை அதிர்வு ஒதுக்கீடு ஏற்கனவே விவாதிக்கப்பட்டது. அடர்த்தி செயல்பாட்டுக் கோட்பாட்டைப் பயன்படுத்தி காஃபினின் கோட்பாட்டு அதிர்வு அதிர்வெண்கள் கணக்கிடப்பட்டுள்ளன. காஃபினின் ஃபிரியர் மாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலையில் (FT-IR), காணப்பட்ட அதிர்வெண்கள் மற்றும் DFT முறையால்கணக்கிடப்பட்ட அதிர்வெண்கள் அட்டவணை 5 இல் வழங்கப்பட்டுள்ளன.



படம். 1. 6-31G (d, p) அடிப்படை தொகுப்புடன் DFT-B3LYP மட்டங்களில் கணக்கிடப்பட்ட காஃபின் உகந்த கட்டமைப்பு அளவுருக்கள்



படம் 2. பிரித்தெடுக்கப்பட்ட காஃபின் மூலக்கூறின் எஃப்.டி.ஐ.ஆர் வரைபடம்

அட்டவணை 5 B3LYP / 6-31G (d, p) ல் காப்பினுக்காக பெறப்பட்ட

அதிர்வு அலை எண்கள்

Observed Wavenumber cm ⁻¹ (FTIR)	Wave number cm ⁻¹	IR intensity (km mol ⁻¹)	Reduced mass (amu)	Polarized ratio	Depolarized ratio	Assignments of fundamental modes	Assignments of fundamental modes and PED % [a]
	64	0.45		0.8571		$\delta(\text{CH}_3)$	$\tau(\text{HCNC}(55))+\beta$ $\text{CCCN}(32)$
			0.32		0.7500		
	70	1.27	0.59	0.8571	0.7500	$\delta(\text{CH}_3)$	$\gamma(\text{HCNC}(92))$
	85	0.78		0.8571		$\delta(\text{CH}_3)$	$\tau(\text{NCNC}(40)+$ $\text{CNCC}(22))$
			0.09		0.7500		
	92	0.58		0.8569		$\delta(\text{CH}_3)$	$\tau(\text{HCNC}(17)+$ $\text{CNCC}(4$ $))+\beta$ $\text{CCCN}(1$ $)$
			0.46		0.7497		
	116	0.28		0.8569		$\delta(\text{CH}_3)$	$\tau(\text{HCNC}(34)+$ $\text{CCNC}(10)+$ $\text{CNCC}(13))+\beta$ $\text{CCCN}(24)$
			0.08		0.7496		
	128	8.90	0.05	0.8571	0.7500	$\delta(\text{CH}_3)$	$\beta \text{CCCN}(50)$
	157	5.83		0.3892		$\delta(\text{CH}_3)$	$\tau(\text{CNCC}(56)+$ $\text{NCNC}(20))$
			0.63		0.2416		
	209	9.26		0.8569		Lattice vibrations	$\alpha(\text{NCN}(33)+$ $\text{CNC}(34))$
			0.16		0.7496		
	214	0.28		0.8571		$\delta(\text{N-CH}_3)$	$\tau(\text{NCNC}(17))+\beta$ $\text{CCCN}(40)$
			0.45		0.7499		
	275	0.15	0.16	0.7731	0.6302	$\delta(\text{N-CH}_3)$	$\beta \text{CCCN}(52)$
	298	2.44	0.67	0.3806	0.2350	$\omega(\text{N-CH}_3)$	$\alpha \text{CNC}(71)$
	354	0.28	0.60	0.8571	0.7499	$\omega(\text{N-CH}_3)$	$\alpha \text{CNC}(67)$
	355	9.16	0.60	0.8527	0.7432	$\omega(\text{N-CH}_3)$	$\tau(\text{CCNC}(25)+$

									CNCC(10))+ β NCNC(28)	
	393	14.65		0.8503					β (N-CH ₂)+ β (CCO)	α (OCC(45)+ CNC(12))
			2.26			0.7396				
	408	12.26		0.8564					ν (NCO)+ ν (N-CH ₃)	α (OCN(40)+ CNC(14))
			0.39			0.7489				
420 (s)	445	14.87		0.8539					Lattice distortion	ν NC(13)+ α (CNC(32)+ NCN(10))
			3.62			0.7450				
440 (s)	485	24.78		0.2024					Ring stretch + Ring distortion	α (NCN(27)+ CNC(11))
			3.52			0.1126				
450 (s)	555	0.80	21.36	0.8571		0.7499			Ring breathing	ν NC(50)
	610	12.01	1.91	0.3814		0.2356			ν (NCH)	τ NCNC(64)
610 (s)	647	0.84		0.8571					ν (NCO+CNC+NCH)	ν NC(12)+ α CNC(20)
			4.85			0.7499				
626 (s)	701	0.01		0.8560					β (NCH)	τ CCNC(14)+ β (ONCC(46)+ NCNC(20))
			0.02			0.7483				
702 (vs)	736	24.40		0.8571					β (NCN+NCO+CNC)	τ CCNC(13)+ β ONNC(55)
			0.08			0.7500				
	753	14.28		0.3796					Ring stretch	τ CCNC(16)+ β ONNC(74)
			0.71			0.2343				
710 (s)	753	1.34		0.2875					Lattice vibration + Ring breathing	ν NC(25)+ α NCN(18)
			4.90			0.1679				
	812	1.25		0.8570					α (NCN+NCO+CNC +NCH)	α (OCN(18)+ CCN(15))
			5.28			0.7498				
840 (m)	856	12.75		0.6589					α (NCN+CNC+NCO+ NCH)	τ (HCNC(86)+ NCNC(12))
			0.40			0.4913				
900 (s)	944	2.36		0.8571					α (NCN+CNC+NCH)	ν NC(16)+ α CNC(17)
			8.04			0.7500				
	991	30.39		0.3572					α (NCC+CNC+NCN)	ν NC(45)+ α CNC(10)
			2.79			0.2174				

	1042	73.62		0.5252		$\omega(\text{N-CH}_3)$	$\nu\text{NC}(32)+\alpha$ CNC(11)+ τ HCNC(24)
			1.55		0.3561		
156 (s)	1089	1.18		0.3481		$\omega(\text{N-CH}_3)$	$\nu\text{NC}(21)+\alpha$ NCN(10)+ τ (HC) C(20)
			6.02		0.2107		
	1091	1.68		0.8562		$\omega(\text{N-CH}_3)$	$\nu\text{NC}(14)+\alpha$ (NCN(11)+ HCH(12))+ τ (HC C(42)
			8.18		0.7486		
	1150	0.04		0.8570		$\beta(\text{CH}_3)$	α HCH(29)+ τ HCNC(69)
			1.44		0.7497		
	1154	0.55	1.53	0.8571	0.7500	$\beta(\text{CH}_3)$	τ HCNC(51)
	1156	0.05	3.85	0.6435	0.4744	$\beta(\text{CH}_3)$	τ HCNC(51)
80 (ms)	1212	13.89		0.7083		$\alpha(\text{NCH})+\nu(\text{N-CH}_3)$	$\nu\text{NC}(17)+\alpha$ HCN(33)
			1.27		0.5484		
	1241	15.27		0.8541		$\beta(\text{CH}_3)+\alpha(\text{NCH})+\nu(\text{N-CH}_3)$	$\nu\text{NC}(30)$
			3.39		0.7454		
	1263	56.81		0.3787		$\nu(\text{N-CH}_3)$	$\nu\text{NC}(10)+\alpha$ HCN(22)
			17.05		0.2336		
240 (s)	1274	34.89		0.5835		$\nu(\text{N-CH}_3)$	$\nu\text{NC}(20)+\alpha$ HCH(11)+ τ HCNC(30)
			5.16		0.4119		
268 (s)	1308	35.52		0.3437		$\alpha(\text{NCH})$	$\nu\text{NC}(26)+\alpha$ CNC(18)
			22.93		0.2075		
	1366	52.55		0.5477		Ring stretch(CNC+CCN+ NCO)	$\nu\text{NC}(21)$
			21.33		0.3772		
	1390	57.01		0.4223		$\gamma_3(\text{CH}_3)$	$\nu\text{NC}(25)+\alpha$ NCN(12)
			47.40		0.2677		
380 (s)	1422	19.40	5.89	0.8516	0.7416	$\gamma_2(\text{CH}_3)$	$\nu\text{NC}(45)$
	1449	30.66	1.96	0.8359	0.7181	$\gamma_2(\text{CH}_3)$	α HCH(63)
60 (ms)	1457	29.37	30.95	0.6882	0.5246	$\gamma_{\text{as}}(\text{CH}_3)$	α HCH(46)

1440 (w)	1481	11.13		0.8530		$\nu_{sa}(\text{CH}_3)$	$\alpha \text{HCH}(73)+\tau$ HCNC(19)
			20.16		0.7437		
	1493	9.26	17.67	0.8571	0.7499	$\pi(\text{N-CH}_3)+\beta(\text{NCC})$	$\alpha \text{HCH}(39)$
	1494	152.86		0.8571		$\beta(\text{CH})+\beta(\text{CH}_3)+\tau(\text{N-CH}_3)$	$\alpha \text{HCH}(76)+\tau$ HCNC(13)
			15.99		0.7499		
	1498	10.48		0.7826		$\rho(\text{N-CH}_3)+\beta(\text{CH})$	$\alpha \text{HCH}(77)+\tau$ HCNC(14)
			19.37		0.6428		
	1509	17.78		0.8387		$\rho(\text{N-CH}_2)+\beta(\text{CH})$	$\alpha \text{HCH}(64)+\tau$ HCNC(22)
			17.58		0.7222		
	1514	32.42		0.8396		$\rho(\text{N-CH}_2)+\beta(\text{CH})+\beta(\text{CH}_3)$	$\alpha \text{HCH}(50)$
			8.39		0.7235		
1500 (w)	1531	42.35		0.7979		$\nu(\text{N-CH}_3)+\alpha(\text{NCN})+\alpha(\text{CNC})$	$\nu \text{NC}(20)+\alpha$ HCH(43)
			11.70		0.6637		
1550 (vs)	1583	153.14		0.3702		$\nu(\text{N-CH}_2)+\alpha(\text{NCO})+\alpha(\text{NCN})$	$\alpha \text{CCN}(28)$
			5.37		0.2272		
	1629	79.79		0.3152		$\nu(\text{N-CH}_3)+\alpha(\text{NCO})+\alpha(\text{NCN})$	ν (CC(51)+NC(24))
			33.05		0.1871		
1660 (s)	1721	892.04	25.32	0.2635	0.1517	$\nu(\text{CO})$	$\nu \text{OC}(73)$
1700 (s)	1761	421.91	39.67	0.1095	0.0579	$\nu(\text{CO})$	$\nu \text{OC}(71)$
	3071	46.11	135.09	0.0562	0.0289	$\nu_a(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(100)$
	3072	18.33	144.35	0.0823	0.0429	$\nu_a(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(100)$
2954 (s)	3074	29.00	154.16	0.8570	0.7497	$\nu_a(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(100)$
	3138	11.32	75.77	0.8571	0.7499	$\nu_a(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(100)$
	3141	13.61	73.52	0.8568	0.7494	$\nu_a(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(99)$
	3152	5.20	58.71	0.8571	0.7500	$\nu_a(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(97)$
	3161	7.32	65.35	0.8300	0.7093	$\nu_s(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(92)$
	3186	0.32	30.86	0.8322	0.7127	$\nu_s(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(83)$
	3194	0.80	41.22	0.4388	0.2811	$\nu_s(\text{CH}_3)$	$\nu \text{CH}(87)$
3186 (s)	3264	1.69	108.57	0.8571	0.7500	$\nu(\text{CH})$	$\nu \text{CH}(99)$

ν -stretching, ν_s -symmetric stretching, ν_a -Asymmetric stretching, α -in-plane-bend, ρ -scissoring, β -out-of-plane bend, π -symmetric bend, δ -twist, ω -wagging, ν -bend

[a] Calculated assignments of fundamental modes using VEDA software along with PED in %

4.1. ஹைட்ரோ கார்பன் அதிர்வுகள்

நைட்ரஜனுடன் கூடிய ஹைட்ரோ சமூகி நறுமண கலவைகள் ஹைட்ரோ கார்பன் நீட்சி பட்டை அதிர்வை 3100–3000 செ.மீ – 1 இல் கொடுக்கின்றன. இந்த பட்டை அதிர்வு பென்சீன் வழித்தோன்றல்களுக்கு எதிர்பார்க்கப்பட்ட அதே பிராந்தியத்தில் உள்ளது. இவை நடுத்தரம் முதல் வலுவான ஒளிச்செறிவைக் கொண்டுள்ளது. இந்த ஒளிச்செறிவு ப்யூரின்ஸ் மற்றும் பிரிமிடினுடன் ஒத்திருக்கிறது [21]. பிரிமிடின்கள் உயர் C-H நீட்சி பட்டைகளைக் காட்டுகின்றன. மேலும் அதிக அதிர்வெண் மாற்றத்தைக் காட்டுகின்றன, அவை மாற்று மாற்றங்களால் ஏற்படலாம். ஃபூரியர் மாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலையில் (FT-IR) 2825, 2954, 3001 மற்றும் 3027 செ.மீ – 1 இல் இருக்கும் அதிர்வு பட்டைகள் முறையே சாந்தைன், காஃபின், தையோபிலின் மற்றும் தையோபிரோமைன் ஆகியவற்றின் C-H நீட்சிகள் காரணமாக அமைகின்றன. 5-புரோமோ-2 நைட்ரோபிரிடின் கலவைக்கு, 3111, 3051, 3048 செ.மீ⁻¹ இல் உள்ள அதிர்வெண்கள் C-H நீட்சியை குறிக்கின்றன மற்றும் 2, 3, 5 ட்ரை-அயோடோபென்சோயிக் அமிலத்தில், அதிர்வெண்கள் 3060 செ.மீ⁻¹ மற்றும் 3022 செ.மீ⁻¹ C-H நீட்சியை குறிக்கின்றன. எனவே தற்போதைய ஆய்வில், PED (100%) மற்றும் 3186 cm⁻¹ (99%) உடன் 2954 செ.மீ⁻¹ இல் காணப்பட்ட வலுவான ஒளிச்செறிவு பட்டைகள் C-H நீட்சிக்கும் அதிர்வு முறைகளை குறிக்கின்றன. 1300 செ.மீ⁻¹, 1380 செ.மீ⁻¹, 1345 செ.மீ⁻¹ என கணக்கிடப்பட்ட மதிப்புகள் ஊழ்3 நீட்சிக்கான 1377 செ.மீ⁻¹ அதிர்வெண்ணுடன் நல்ல உடன் பாட்டில் உள்ளது.

4.2. கார்போனைல் அதிர்வுகள்

கார்போனைல் குழு காஃபின் போன்ற ஆல்கலாய்டுகளில் உள்ளது. ஆல்கலாய்டுகள் மருத்துவ முக்கியத்துவம் வாய்ந்தவை. இவை பல தாவரங்களில் இயற்கையாகவே இருக்கின்றன. இவற்றிற்கு C=O நீட்சிக்கான அதிர்வு 1850 – 1550 செ.மீ⁻¹ல் ஒரு வலுவான உட்கவர்தல் பட்டையாக காணப்படுகிறது

[22, 23]. ஹைட்ராக்சைல் குழுக்களைக் கொண்ட பிரிமிடின்கள் பொதுவாக கீட்டோ வடிவத்தில் உள்ளன மற்றும் டா டாமெரிசம் காரணமாக இப்பகுதியில் வலுவான உட்கவர்தல் பட்டைகளை வெளிப்படுத்துகின்றன.

இந்த ஒளிச்செறிவு அதிகமுள்ள அகச்சிவப்பு பட்டைகளை எந்த குறுக்கீடும் இல்லாமல் எளிதில் அடையாளம் காண முடியும் [21]. ஆய்வின் கீழ் உள்ள மூலக்கூறு இரண்டு கார்போனைல் குழுக்களைக் கொண்டுள்ளது மற்றும் அனைத்து சாறுகளின் ஃபூரியர் மாற்று அகச்சிவப்புநிறமலைகளில் (FT-IR) 1700 (71%) மற்றும் 1660 செ.மீ⁻¹ (73) இல் ஒரு வலுவான பட்டை ஒளிச்செறிவு கிடைக்கப்பெற்றது இவை டி.எஃப்.டி முறையில் கணக்கிடப்பட்ட 1761 மற்றும் 1721 செ.மீ⁻¹ மதிப்புகளுடன் ஒத்துபோகின்றன. கார்போனைல் குழுவின் தன்மையை பாரம்பரிய வேதியியல் சோதனைகள் அல்லது பிற அகச்சிவப்பு உட்கவர்தல் மூலம் நிறுவ முடியுமானால், கார்போனைல் நீட்சி உட்கவர்தல் உச்சத்தின் சரியான நிலையில் இருந்து ஏராளமான கட்டமைப்பு தகவல்களைப் பெற முடியும். C=O உறிஞ்சுதல் 1680–1630 செ.மீ⁻¹ வரம்பில் நிகழ்கிறது. ஒரு கார்போனைல் குழுவின் நீட்சி அதிர்வெண் அதனுடன் இணைக்கப்பட்டுள்ள அல்கைல் குழுக்களின் எண்ணிக்கை அதிகரிக்கும்போது குறைகிறது.

4.3. நைட்ரோ கார்பன் அதிர்வுகள்

1060 செ.மீ⁻¹ இல் கிடைத்த காஃபின் C-N நீட்சி அதிர்வெண் டி.எஃப்.டி முறையால் கணக்கிடப்பட்ட மதிப்புடன் 1050 செ.மீ⁻¹ நன்கு பொருந்துகிறது. 1244 செ.மீ⁻¹ இல் கிடைத்த C=N நீட்சி அதிர்வெண் டி.எஃப்.டி முறையால் கணக்கிடப்பட்ட மதிப்புக்களுடன் 1220 செ.மீ⁻¹, 1240 செ.மீ⁻¹, 1260 செ.மீ⁻¹ நல்ல உடன்பாட்டில் உள்ளது. பக்கச் சங்கிலியில் நைட்ரஜன் அணுவுடன் இணைக்கப்பட்ட மெத்தில் குழுவின் காரணமாக C-N அதிர்வு N-மெத்தில் பிரிடினியம் அயனியில் சுமார் 1150 செ.மீ⁻¹ இல் காணப்படுகிறது. இதே அதிர்வு தியோபிலினில் 973 செ.மீ⁻¹ இல் வலுவான பட்டையாக இருக்கின்றது [20]. காஃபினின் C-N அதிர்வுகள் 1157 செ.மீ⁻¹ இல் இருக்கின்றன. நறுமண

மற்றும் கீட்டோ-நறுமண கட்டமைப்புகளின் C-H நீட்சி அதிர்வுகள் 3000 செ.மீ.⁻¹ முதல் 3100 செ.மீ.⁻¹ வரை ஏற்படுகின்றன. இது மூலக்கூறின் கட்டமைப்பை சரியாக அடையாளம் காண போதுமானதாக உள்ளது. இந்த இடத்தில் உள்ள மாற்றீடுகளின் தன்மை மற்றும் நிலை காரணமாக ஒளிச்செறிவு பட்டைகள் அதிகம் பாதிக்கப்படுவதில்லை.

4.4 கரிம அதிர்வுகள்

வளைய C-C நீட்சி அதிர்வுகள் 1625 செ.மீ.⁻¹ முதல் 1430 செ.மீ.⁻¹ வரை ஏற்படுகின்றன. கரிம அறுங்கோண வளையங்களுக்கு, எடுத்துக் காட்டாக, பென்சீன்கள் மற்றும் பிரிடீன்கள், அடிப்படை அதிர்வுகளால் இப்பகுதியில் இரண்டு அல்லது மூன்று பட்டை ஒளிச்செறிவுகள் உள்ளன, இவற்றுள் வலிமையானவை பொதுவாக 1500 செ.மீ.⁻¹ இல் இருக்கும். ஃபினைல் தொகுதியின் C-C நீட்சி முறைகள் 1650 முதல் 1200 செ.மீ.⁻¹ வரையிலான வரம்புகளில் எதிர்பார்க்கப்படுகின்றன. இந்த முறைகளின் உண்மையான நிலை மாற்றீடாக வைக்கப்பட்ட தொகுதிகளின் தன்மையால் தீர்மானிக்கப்படுவதில்லை, ஆனால் வளையத்தைச் சுற்றியுள்ள மாற்று வடிவத்தால் தீர்மானிக்கப்படுகிறது [21]. பொதுவாக, பட்டைகள் மாறக்கூடிய ஒளிச்செறிவினை கொண்டவை, மேலும் அவை 1625-1590, 1590-1575, 1540-1470, 1465-1430 மற்றும் 1380-1280 செ.மீ.⁻¹ ஆகியவற்றில் வர்சானி (Varsanyi) வழங்கிய அதிர்வெண் வரம்புகளில் காணப்படுகின்றன [22]. தற்போதைய ஆய்வில், காஃபினின் 1157 செ.மீ.⁻¹ மற்றும் 1060 செ.மீ.⁻¹ இல் நிகழும் அதிர்வுகள் C-C நீட்சி முறைக்கு ஒதுக்கப்படுகின்றன.

4.5. வளைத்தல் மற்றும் சிதைவு அதிர்வுகள்

557-636 செ.மீ.⁻¹ மற்றும் 393-535 செ.மீ.⁻¹ பகுதிகள் முந்தைய ஆராய்ச்சியாளர்களால் கீட்டோனிக் காப்போனைல் தொகுதியின் சிதைவு அதிர்வுகளை குறிப்பதாக காட்டப்பட்டது [23, 24]. C=O சிதைவு பட்டைகள் 611 செ.மீ.⁻¹ மற்றும் 538 செ.மீ.⁻¹ இல் நிகழ்கின்றன. மேலும் 611

செ.மீ.⁻¹ இல் ஒதுக்கப்பட்ட C=O சிதைவு அதிர்வெண்டின் ஃபினைல் முறையால் கணக்கிடப்பட்ட மதிப்பான 610 செ.மீ.⁻¹ உடன் பொருந்துகிறது. புறஊதா நிறமாலையில் 420 செ.மீ.⁻¹ மற்றும் 450 செ.மீ.⁻¹ இல் வளைய நீட்சி மற்றும் அதிர்வு சுவாச முறைகள் காணப்படுகின்றன. இந்த முறைகள் ஆல்கலாய்டுகளின் பண்புகளை காட்டுகின்றன மற்றும் சூன வெளித்தள வளைவானது PED க்கு 50% வரை பங்களிக்கிறது.

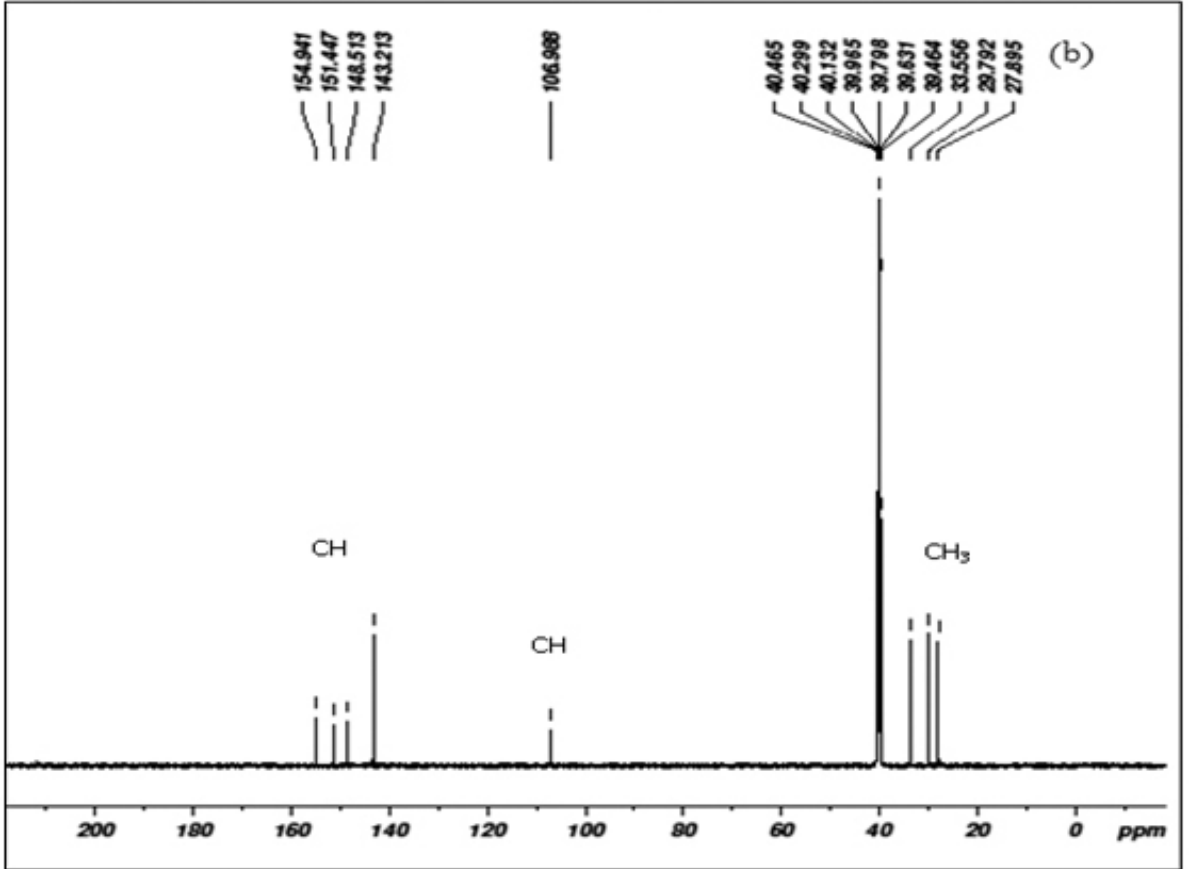
5. அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு [NMR] ஆய்வுகள்

¹³C அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு ¹H அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு நிறமாலை பகுப்பாய்வு ஆகியவை கரிம சேர்மங்களின் கட்டமைப்பை ஆய்வு செய்ய பயன்படுத்தப்படும் முக்கியமான பகுப்பாய்வு நுட்பங்களாகும். வெவ்வேறு வினைத்தொகுதிகள் வெவ்வேறு வேதியியல் நகர்வுகளைக் கொண்டுள்ளன, எனவே ஒரு அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு நிறமாலை மற்றும் வேதியியல் நகர்வுகளில் கொடுக்கப்பட்ட சமிக்ஞையை ஒப்பிட்டு ஒரு மூலக்கூறில் உள்ள செயல்பாட்டு தொகுதிகளை அடையாளம் காண முடியும். ¹³C அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு மற்றும் ¹H அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு நிறமாலை ஆகியவை படம் 3 இல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளன.

பொதுவாக, கரிமச் சேர்ம வளையங்களில் உள்ள ஹைட்ரஜன் அணுக்கள் 6.5 பிபிஎம் முதல் 8.5 ppmக்கு இடைபட்ட வரம்பில் சமிக்ஞைகளை கொடுக்கின்றன. ¹H அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு நிறமாலையில் 3.118 முதல் 3.457 ppm வரை உள்ள மூன்று முகடுகள் மெத்தில் தொகுதி புரோட்டான்கள் இருப்பதைக் காட்டுகிறது. 7.392 ppm-ல் உள்ள சமிக்ஞை இமிடசோலுடன் இணைக்கப்பட்ட C-H (H2) அணுவின் காரணமாக இருக்கலாம். இந்த கீழ்நிலை அதிர்வுக்கு காரணம் (H2) அருகிலுள்ள N2 உடன் இணைக்கப்பட்டுள்ள CH3 தொகுதி ஆகும். இவை ¹H அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு நிறமாலையில் 10 புரோட்டான்கள் மட்டுமே இருப்பதை தெளிவாகக் காட்டுகின்றன. மேற்கோளில் குறிப்பிட்டுள்ளபடி [25],

அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு நிறமாலையில் பதிவுசெய்யப் பயன்படும் டிபூட்ரியம் ஆக்கப்பட்ட கரைப்பான்களில் உள்ள எஞ்சிய புரோட்டான்கள் மற்றும் நீரின் மூலக்கூறுகள் 2.5 ppm -க்கு அருகாமையில் புரோட்டான் சமிக்ஞையை வெளிப்படுத்துகின்றன. ^{13}C அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு நிறமாலையில் 106.988 ppm-ல் உள்ள சமிக்ஞை இமிடாசோலுடன் இணைக்கப்பட்ட கார்பன் அணுவை (C1) காட்டுகிறது. 154.941 மற்றும் 151.447 ஆகியவற்றில் காணப்பட்ட முகடுகள் கரிம வளையத்தில் அமைபுடன் இணைக்கப்பட்டுள்ள கார்பன் அணுக்களைக் காட்டுகிறது (C 4, C 8).

148.513 (C 3) மற்றும் 143.213 (C 2) ppm-ல் உள்ள சமிக்ஞை பென்சீன் வளையத்தில் உள்ள கீட்டோ தொகுதியால் ஏற்படுகிறது [26]. 27.895 (C 5), 29.792 (C 7) மற்றும் 33.556 ppm (C 6) ஆகியவற்றில் குறிப்பிடப்பட்டுள்ள சிகரங்கள் மெத்தில் தொகுதியின் சமிக்ஞைகளால் ஏற்படுகின்றன. வேதியியல் மாற்றங்களில் கரைப்பான்களின் விளைவுகள் 39 ppm முதல் 40 ppm வரை காணப்படுகின்றன. ^1H மற்றும் ^{13}C அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு நிறமாலையின் கட்டமைப்பு பல்வேறு வினைத்தொகுதிகள் இருப்பதை உறுதிப்படுத்துகிறது. இதைத்தவிர வேறு எந்த குறிப்பிடத்தக்க முகடுகளும் காணப்படாததால், தொகுக்கப்பட்ட கலவை தூய



படம் 3. பிரித்தெடுக்கப்பட்ட காஃபின் மூலக்கூறின் (அ) ^1H என்எம்ஆர் மற்றும் (ஆ) ^{13}C என்எம்ஆர்

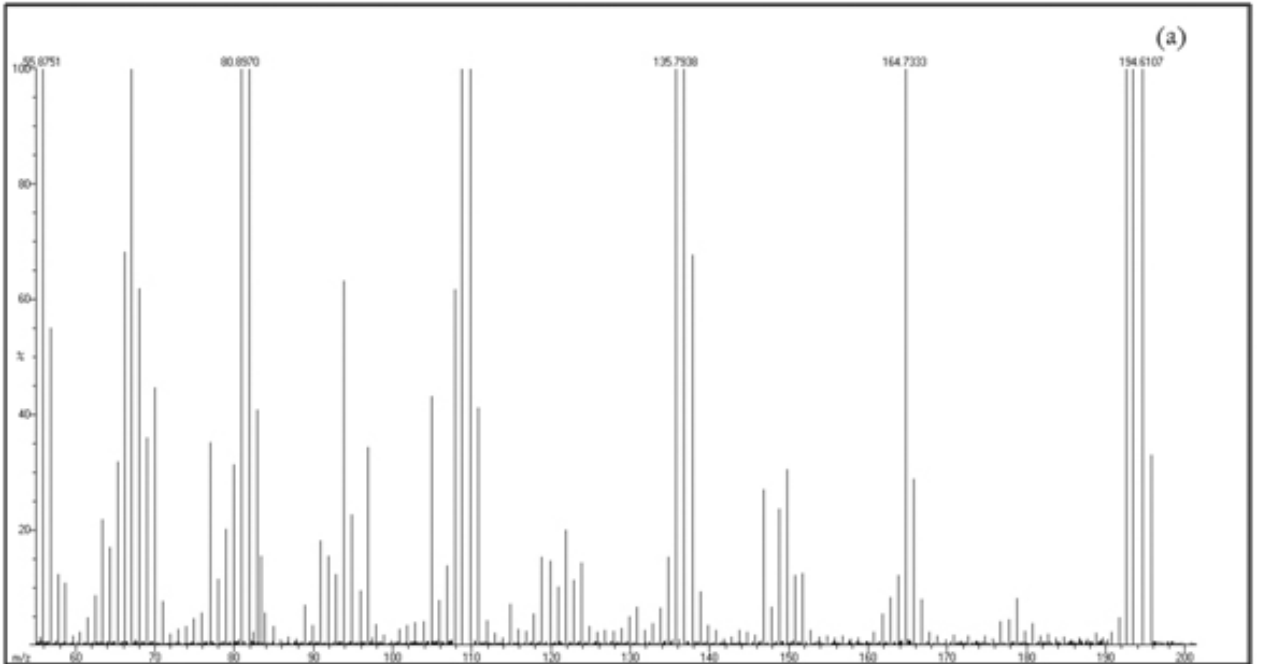
காஃபின் என்பது உறுதிப்படுத்தப்படுகிறது.

6. நிறை நிறமாலை பகுப்பாய்வு

நிறை நிறமாலையியல் என்பது மூலக்கூறு எடையை அளவிடுவதற்கும் ஒரு கரிம மூலக்கூறின் மூலக்கூறு சூத்திரத்தை தீர்மானிப்பதற்கும் பயன்படுத்தப்படும் ஒரு நுட்பமாகும். உயர் ஆற்றல் எலக்ட்ரான்களின் ஒரு கற்றை மூலக்கூறை பல துண்டுகளாக துண்டிக்கிறது. துண்டுகளின் நிறைகளும் அவற்றின் ஒப்பீட்டளவும் மூலக்கூறின் அமைப்பு பற்றிய தகவல்களை கூறுகின்றன.

ஒரு மூலக்கூறின் துண்டு துண்டான முறை ஒரு ஐசோமரை இன்னொரு ஐசோமொரிலிருந்து வேறுபடுத்தி அறிய உதவும். குறிப்பாக நிறை நிறமாலையியல் அயனிகளின் நிறைக்கும்-மின்சுமைக்கும் உள்ள விகிதத்தை (M/z) அள

விடுகிறது, பொதுவாக நேர்மின்சுமை உள்ள அயனிகள். காஃபின் போன்ற அல்கைல் சாந்தைன்களின் நிறை நிறமாலையில் செறிவு மிக்க அயனி சிகரங்களைக் காட்டுகிறது, அவை மிகவும்நிலையானப்யூரின்வழித்தோன்றல்களின் சிறப்பியல்புகளாகும் [27]. பிரித்தெடுக்கப்பட்ட காஃபின் மூலக் கூறின் நிறை நிறமாலை படம் 4 இல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது. M/z 195 இல் உள்ள நேர்மறை அயனி முகடானது தாய் மூலக்கூறைக் (ஆ) குறிக்கிறது, இது ஒரு எலக்ட்ரான் அகற்றப் பட்டதால் மூலக்கூறு அயனியாக மாறுகிறது, M^+ . மூலக்கூறு அயனி காஃபினுக்கு கீழே காட்டப்பட்டுள்ளபடி தொடர்ச்சியான துண்டு அயனிகளை உருவாக்குகிறது: காஃபின் மற்றும் அதன் துண்டு துண்டான அயனிகள் m/z 165, 137, 109 தூய காஃபின் இருப்பதைக்



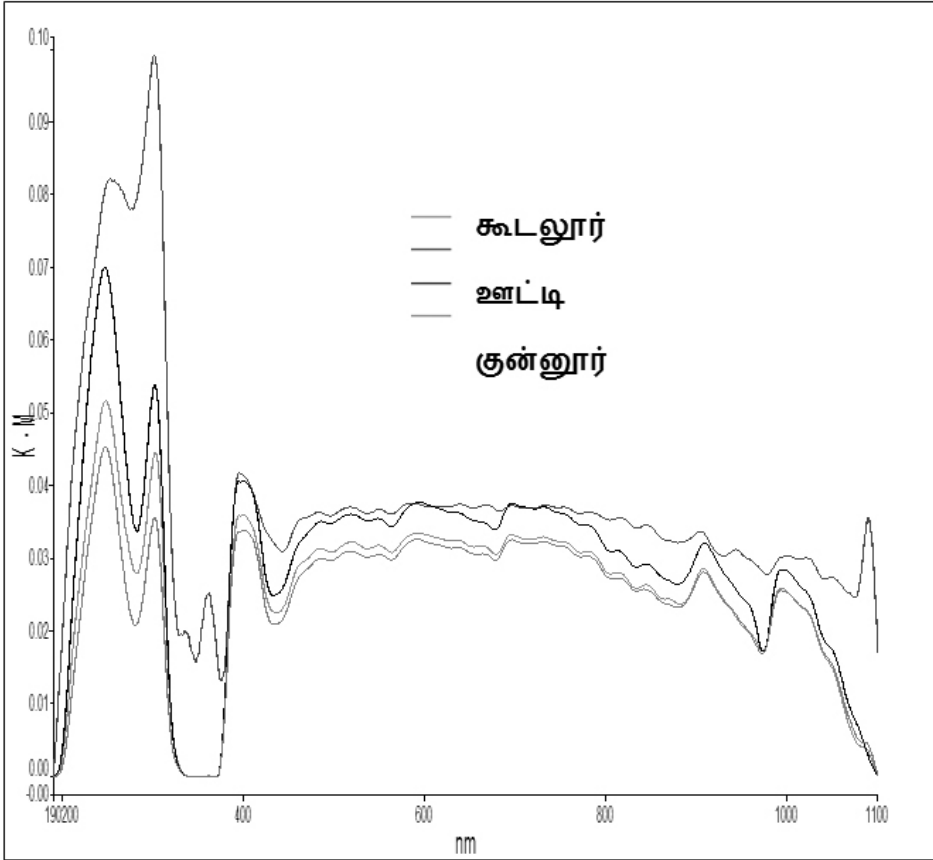
படம் 4 (அ) பிரித்தெடுக்கப்பட்ட காஃபின் மூலக்கூறின் நிறை நிறமாலை மற்றும் (ஆ) துண்டல் திட்டம்

உறுதிப்படுத்துகின்றன [28].

7. மின்னணு உட்கவர் நிறமாலை

பிரித்தெடுக்கப்பட்ட அனைத்து சேர்மங்களின் எலக்ட்ரானிக் நிறமாலை அறை வெப்பநிலையில் நான்கு மாதிரிகளுக்கு அளவிடப்பட்டது. இது படம் 5 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. புற ஊதா-உட்கவர் நிறமாலையில் ஊட்டியிருந்து எடுக்கப்பட்ட மாதிரிக்கு λ_{max} 297 nm-லும், பிற மாதிரிகளுக்கு λ_{max} 247 nm-லும் உள்ளது. 300 -396nm-ல் உள்ள சிகரங்கள் கரிம வளையத்தின் மிதமான ஆற்றல் இடப்பெயர்வினால் இருப்பதாக கருத்தில் கொள்ளலாம் [29, 30]. கார்போனைல் தொகுதிகளான நிறைவுற்ற ஆல்டிஹைடுகள்

மற்றும் கீட்டோன்கள் புற ஊதா பிராந்தியத்தில் 270 nm மற்றும் 300 nm இடையே பலவீனமான உட்கவர் பட்டைகளைக் கொடுக்கின்றன. இரண்டுமே ஒரு எலக்ட்ரானை எதிர் பிணைப்பு $\pi \rightarrow \pi^*$ சுற்றுப்பாதைக்கு ($n \rightarrow \pi^*$ மற்றும் $\pi \rightarrow \pi^*$) தூண்டுவதை உள்ளடக்குகின்றன. கரிம குரோமோபோர்களில் இருந்து, இந்த சாற்றில் கார்போனைல் தொகுதி இருப்பது தெளிவாகிறது, இது 300 nm இல் உள்ள முகடின் மூலம் உறுதிப்படுத்தப்படுகிறது, இது $n \rightarrow \pi^*$ இடப்பெயர்வுகளுக்கு ஒத்திருக்கிறது. இந்த இரண்டு பட்டைகள் மாதிரிகளில் உள்ள $\pi \rightarrow \pi^*$ இடப்பெயர்வுகளுக்கு காரணமாக உள்ளன.. எனவே கலவை ஒரு தூய காஃபின் மூலக்கூறு



படம் 5 பிரித்தெடுக்கப்பட்ட காஃபின் மூலக்கூறின் மின்னணு நிறமாலை

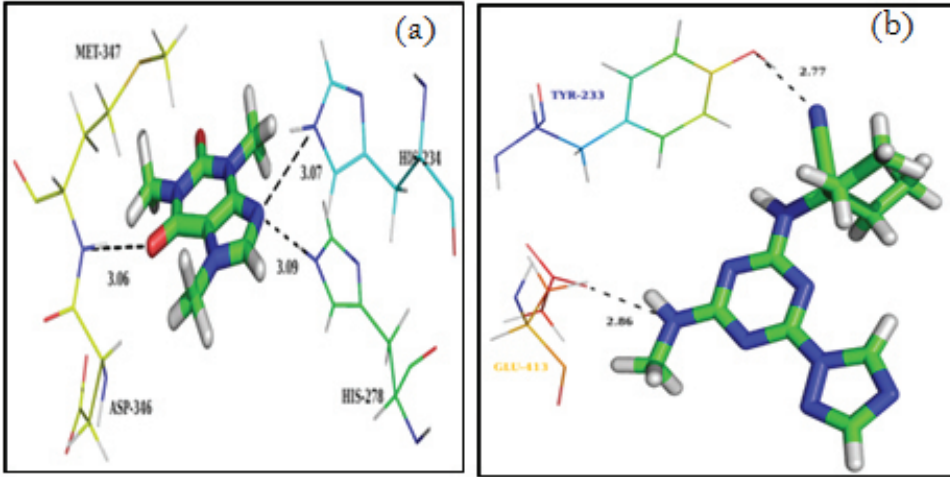
என்பது உறுதிப்படுத்தப்படுகிறது.

8. காஃபின் மூலக்கூறு பிணைத்தல் ஆய்வுகள் - இலக்கு புரதம் PDE4B

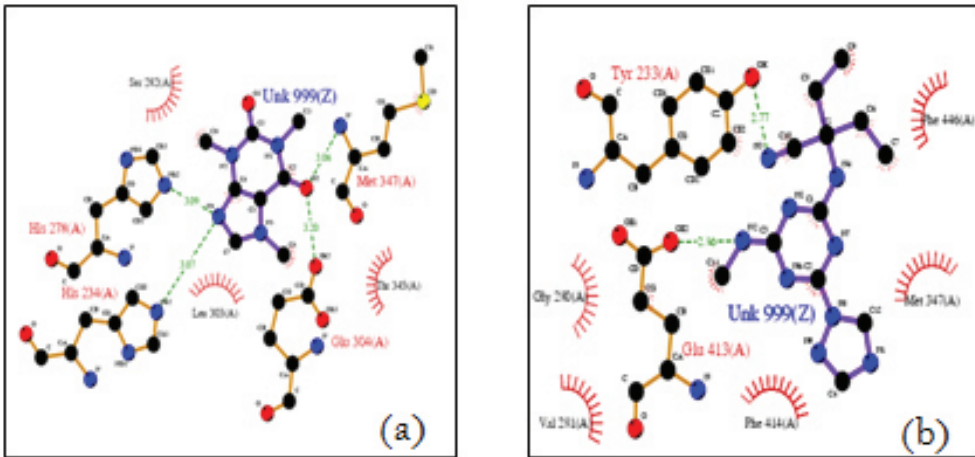
8.1. இலக்கு புரத அமைப்பு தயாரிப்பு

மனித பாஸ்போடையஸ்டீர்ஸ் 4B (PDE4B) (PDB ID: 4KP6) இன் எக்ஸ்ரே படிக அமைப்பு RCSB புரோட்டீன் டேட்டா வங்கியிலிருந்து (PDB) பெறப்பட்டது [31]. படிகமயமாக்கலின் நீர் மூலக்கூறுகள் கரிமச்சேர்மத்திலிருந்து அகற்றப்பட்டன, மேலும் ஹைட்ரஜன் அணுக்கள் சேர்க்கப்பட்டு புரதம் கட்டமைக்கப்பட்டது. பகுதி புலத்திற்கு ஏற்ப பகுதி அணு மின்சமைகளும் ஒதுக்கப்பட்டன. ஹைட்ரஜன் அல்லாத அணுக்களின் சராசரி வர்க்க மூலத்திற்கான

விலகல் 0.3Å ஈட்டும்வரை OPLS-AA விசை புலத்தில் ஷ்ரோடிங்கர் சூட் 2011 இன் புரத தயாரிப்பு வழிகாட்டி [32]ஐப் பயன்படுத்தி குறைப்புக்கள் மேற்கொள்ளப்பட்டு கடுமையான தடைகள் (steric hindrance) நீக்கப்பட்டன. இலக்கு புரதம் PDE4B மற்றும் காஃபின் இடையே தூண்டப்பட்ட பொருத்துதல் நறுக்குதல் மேற்கொள்ளப்பட்டது. PDE4B இன் செயலில் உள்ள இடத்தில் அமினோ அமிலங்களுடன் காஃபின் ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு இடைவினைகள் அட்டவணை 6இல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளன. PDE4B இன் செயலில் உள்ள இடத்தில் அமினோ அமிலங்களுடன் காஃபின் ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு இடைவினைகள் மற்றும் அதன் LIG PLOT பார்வை முறையே படம் 6 மற்றும் படம் 7



படம் 6 (அ) காஃபின் மூலக்கூறின் ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு மற்றும் (ஆ) இலக்கு PDE4B இன் செயலி



படம் 7 (அ) காஃபின் மற்றும் (ஆ) பூர்வீக படிகத்தின் LIGPLOT பார்வை

இல் காட்டப்பட்டுள்ளது.

8.2. காஃபினின் செயல்பாடு

முக்கிய இரண்டாம் நிலை தூதர்களான அடினோசின் மற்றும் குவானோசின்-சைக்ளிக் மோனோபாஸ்பேட்டுகள் (cAMP மற்றும் cGMP) அவற்றின் தொடர்புடைய-மோனோபாஸ்பேட் நியூக்ளியோடைடுகளாக ஹைட்ரோலைசிங் செய்யப்படுவதால், cAMP மற்றும் cGMP-ன் செறிவுகள் குறைந்து, பாஸ்போடையஸ்டீர்ஸ் என்சைம்கள் (PDEs) பல்வேறு உயிரியல் செயல்முறைகளில் முக்கிய பங்கு வகிக்கின்றன மேலும் இது ஒரு முக்கிய சீர்மையாக்கியாக பல முக்கியமான உடலியல் செயல்முறைகளில் செயல்படுகிறது. முதன்மை கட்டமைப்பின் அடிப்படை, அடி மூலக்கூறு விவரக்குறிப்பு மற்றும் உணர்திறன் ஆகியவை ஆகியவை காஃபின்களின் செயல்பாட்டைத் தடுக்கும் காரணிகளாக உள்ளன [33]. மத்திய நரம்பு மண்டலத்தை உறுஆரு யுடன் பிணைக்கும்போது இந்த தூண்டுதல் செயல்படுத்தப்படுகிறது. மனச்சோர்விற்கு மருந்தாகவும், ஆஸ்துமாவுிற்கு மருந்தாகவும் மற்றும் அழற்சி எதிர்ப்பு மருந்தாகவும் மத்திய நரம்பு மண்டல விளைவுகளை மத்தியஸ்தம் செய்யும் காரணியாக உள்ளது.

வினையூக்க செயல்பாடு

அடினோசின் 3', 5'-சைக்ளிக் பாஸ்பேட் + நீர் = அடினோசின் 5'-பாஸ்பேட்

8.3 காஃபினின் உயிரியல் செயல்பாடுகள்:

காஃபின் மற்றும் அடினோசினின் வடிவச் சார்புடைய மூலக்கூறுகளுக்கு இடையே யான கட்டமைப்பு ஒற்றுமைகள் மற்றும் அவற்றுக் கிடையேயான பிணைப்புகள் பற்றியும் விவாதிக்கப்பட்டது. மூளையின் செயல்பாட்டைக் கட்டுப்படுத்துவதில் அடினோசினுக்கு முக்கிய பங்குண்டு. பகல் நேரங்களில், நமது மூளையில் அடினோசின் தேவையான அளவுக்கு சுரந்து, அதன் செறிவு போதுமான அளவுக்கு இருக்குமாயின், அடினோசினானது மூளையின் ஏற்பிகளுடன் பிணைப்பை ஏற்படுத்தும். அவ்வாறு பிணைப்பு ஏற்படுவதன் விளைவாக, மயக்க நிலைக்கோ அல்லது தூக்க நிலைக்கோ

செல்லும் செயல்முறைத் தொடங்கும். இதற்கு முன்பாக, காஃபினானது அடினோசினுடன் பிணைப்பை ஏற்படுத்தினால், மூளையின் ஏற்பிகளுடன் பிணைப்பு ஏற்படுவது தடுக்கப்பட்டு மயக்க நிலைக்கோ அல்லது தூக்க நிலைக்கோ செல்வது தாமதப்படுத்தப்படுகிறது. மேலும், காஃபினானது சைக்ளிக் நியூக்ளியோடைடு பாஸ்போடைஸ்டேரேஸ் (cAMP-PDE) என்கிற நொதி சுரப்பதைத் தடுக்கிறது. இதனால் இரத்த அழுத்தம் அதிகமாகி, மூளைக்கு அதிகப்படியான ஆக்ஸிஜன் செல்வதற்கு தூண்டப்படுகிறது. எனவே, நீண்ட நேரத்திற்கு மூளையினை துடிப்புடன் செயல்த வையத்தால், களைப்பு நீங்கி உற்சாகமாக இருக்க உதவுகிறது.

9. ஆராய்ச்சி முடிவுகள்

இயற்கையில் கிடைக்கிற தேயிலையிலிருந்து, காஃபின் என்கிற வேதிப்பொருளானது பிரித் தெடுக்கப்பட்டது. நிறச் சோதனை, ஒளிவிலகல் சோதனை மற்றும் கரையக்கூடிய நிகர மதிப்பு ஆகியவற்றின் மூலமாக தேயிலையின் தரமானது இந்திய தர நிலையக (BIS) மதிப்பீட்டுடன் ஒப்பிடப்பட்டு ஆராயப்பட்டது. காஃபினின் அளவினைப் பொறுத்து, தேநீரின் கவைத் தரம் மாறுபடுவது விளக்கப்பட்டது. காஃபினின் வடிவ கட்டமைப்பானது, தனிம ஆய்வு, ஃபூரியர் மாற்று அகச்சிவப்பு நிறமாலை (FT-IR), புற ஊதா நிறமாலை (UV), அணுக்கரு காந்த ஒத்திசைவு சோதனை (NMR) மற்றும் நிறை நிறமாலையின் (Mass) மூலமாக உறுதிப்படுத்தப்பட்டது. அடிமட்ட நிலையில், வடிவக் கட்டமைப்பு மற்றும் நிறமாலையியல் தரவுகளானது அடர்வு செயல்பாட்டுக் கோட்பாட்டின் (DFT) மூலமாக, 6-31G(d,p) என்கிற அடிப்படைத் தொகுப்பினைப் பயன்படுத்தி கணக்கிடப்பட்டது.

நிலை ஆற்றல் வேறுபாட்டின் (PED) அடிப்படையில், அதிர்வு முறைகள் தெளிவாக விளக்கப்பட்டது. காஃபினில் உகந்த வடிவக் கட்டமைப்பானது, ஏற்கனவே கிடைக்கப்பெற்ற ஆராய்ச்சி தகவல்களுடன் ஒப்பிடப்பட்டு அட்டவணைப் படுத்தப்பட்டுள்ளது. அடினோசினின் வளர்சிதை மாற்றத்தில், காஃபினின் பங்கு மற்றும் புரத இணைப்பு முறைகள் தெளிவாக

Reference

- [1] A B Kamath, L Wang, H Das, L Li, V N Reinhold and J F Bukowski Proc. Natl. Assoc. Sci. 100 6009 (2003)
- [2] P W Taylor, J M T Hamilton-Miller and P D Stapleton Food Sci. Technol. Bull 2 71 (2003)
- [3] S Shiota et al Biol. Pharm. Bull. 22 1388 (1999)
- [4] H Yasuda and T Arakawa Biosci. Biotechnol. Biochem.59 1232 (1995)
- [5] K Kida, M Suzuki, A Takagaki and F Nanjo Biosci. Biotechnol. Biochem. 66 373 (2002)
- [6] S Masuda, S Uchida and Y Terashima J. Health Sci. 52 211 (2006)
- [7] K Mabe, M Yamada, I Oguni and T Takahashi Antimicrob. Agents Chemother 43 1788 (1999)
- [8] T Nagao et al Am. J. Clin. Nutr. 81 122 (2005)
- [9] T Nagao et al Obesity (Silver Spring) 17 310 (2009)
- [10] Y H Kao, H H Chang, M J Lee and C L Chen Mol. Nutr. Food. Res.50 188 (2006)
- [11] P Velayutham, A Babu and D Liu Curr. Med. Chem. 15 1840 (2008)
- [12] M A Islam Recent Pat. Cardiovasc. Drug Discov. 7 88 (2002)
- [13] I Ikeda et al J. Agric. Food Chem. 51 7303 (2003)
- [14] S M Lee, C W Kim, J K Kim, H J Shin and J H Baik Lipids 43 419 (2008)
- [15] S Gunasekaran, G Sankari and S Ponnusamy Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc. 61 117 (2005)
- [16] F Uzun, A Sağlam and V Güçlü Spectrochimica Acta Part A 67 342 (2007)
- [17] Y Kim et al Food Chemistry 129 1331 (2011)
- [18] M J Frisch et al. Gaussian Inc (Wallingford: CTPA) (2001)
- [19] C Lee, W Yang and R G Parr Phys. Rev. B 37 785 (1988)
- [20] A D Becke J. Chem. Phys. 98 5648 (1993)
- [21] G Socrates Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies,3rd edn. (Chichester: John Wiley & Sons Ltd) (2001)
- [22] G Varsanyi Assignments for Vibrational Spectra of Seven Hundred Benzene

- Derivatives (London: Adam Hilger) (1974)
- [23] P Combelas et al Ann. Chim, 5 315 (1970)
- [24] L J Bellamy The Infrared Spectra of Complex Molecules, 3rd edn. (New York: Wiley) (1975)
- [25] B R Srinivasan, P Raghavaiah and V S Nadkarni Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 112 84 (2013)
- [26] V Sangeetha et al Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 118 1025 (2014)
- [27] Arnold Brossi, The alkaloids: Chemistry and Pharmacology, V38, Academic Press Inc. (1990)
- [28] R Goodacre and R J Gilbert Analyst 124 1069 (1999)
- [29] A Kakanejadifard et al Dyes Pigments 97 215 (2013)
- [30] A Kakanejadifard et al Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 114 404 (2013)
- [31] www.rcsb.org
- [32] Schrödinger Suite 2011, Maestro, version 9.2, Schrödinger, LLC, New York, NY (2011)
- [33] J R Morhig Techniques in Organic Chemistry, 2nd (ed) 158 (2009)

குவானிடீயம் டிரைகுளோரோ அசிடேட் தனி படிகத்தின் வளர்ச்சி பண்பாக்கம் மற்றும் குவாண்டம் வேதி கணக்கீடுகள்

ரா. ஸ்ரீதேவி, ப. விவேக், தா. பாலு, ப. முருகக்கூத்தன், தா. ரா. ராஜசேகரன்
இயற்பியல் துறை, ஆதித்தனார் கலை மற்றும் அறிவியல் கல்லூரி, திருச்செந்தூர்.

ஆய்வுச்சுருக்கம்

நேரில்லா ஒளி செயல் (NLO) திறனுடைய குவானிடீயம் டிரைகுளோரோ அசிடேட் (GTCA) படிகங்கள் தொகுக்கப்பட்டது மேலும் கரைக்கப்பட்டு கரைப்பானிலிருந்து மெதுவாக கரைசல் ஆவியாதல் நுட்பத்தை பயன்படுத்தி வளர்க்கப்பட்டது. வளர்ந்த படிகமானது ஒற்றை படிக X-கதிர் விளிம்பு விளைவு (SXR) மூலம் பகுப்பாயப்பட்டது. GTCA-வின் பூரியர் கட்ட மாறுபாடு அகச்சிவப்பு பகுப்பாய்வு (FTIR) நிற நிறமாலை பதிவு செய்யப்பட்டது. மேலும் பல்வேறு செயல்பாட்டு குழுக்களின் அதிர்வெண் ஒப்பீடுகள் பகுப்பாயப்பட்டது. UV-VIS NIR நிறமாலை பதிவிடப்பட்டு ஆற்றல் பட்டை இடைவெளி கணக்கிடப்பட்டது. வடிவியல் தேர்வு முறை முதல் வரிசை மிகைப்பு முனைவாக்கம், HOMO-LUMO ஆற்றல் இடைவெளி முழுமை எதிர்வினை மாறிலிகள் B3LYP/6, G(d,P) அடிப்படை செட் மற்றும் DFT முறையை பயன்படுத்தி கணக்கிடப்பட்டு பகுத்தாயப்பட்டது.

முக்கிய வார்த்தைகள் : SXR, FTIR, DFT, மிகைப்பு முனைவாக்கம்

முன்னுரை :

நேரில்லா ஒளி (NLO) ஓர் வளர்ந்து வரும் துறை இது மூலப் பொருள்களில் பயனூறு மின்காந்த புறங்களில் உள் வினையை செயல் தொடர்புற்று புதிய மின் காந்தப் புலம் திருத்தப்பட்ட அலையின் கட்டம் அல்லது பிற உயர் பண்புகளை தோற்றுவிக்கிறது [1]. இந்த பொருட்கள் நேரில் ஆ செயல்களால் உருவாக்க முடியும். இது பல்வேறு துறைகளில் அதாவது ஒளி தகவல் தொடர்பு சைகை செயற்படுத்துதல் ஒளி கணக்கீட்டை உணர்தல் மற்றும் இயங்குபிம்ப செயற்படுத்துதல் மற்றும் பல [2-4]. கரிம பொருட்கள் அதன் ஒத்த நிலையுடைய கனிமம் மற்றும் குறைகனிம பொருட்களைவிட அதன் அதிக நேரில்லா ஒளி ஏற்பதையினால் [5,6]. NLO பயன்பாட்டில் அதிக செயல் திறன் உடையதாக

கண்டறியப்பட்டுள்ளது.

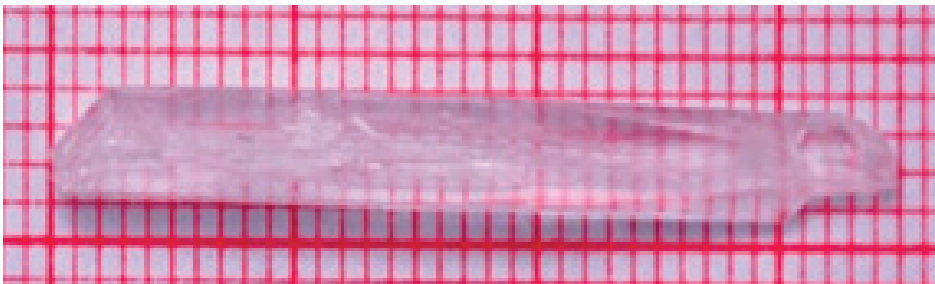
தற்கால அறிக்கைகள் குவானிடீயம் மற்றும் அதன் வழி பொருட்கள் NLO பயன்பாடுகளில் ஓர் கரிம நிலை பண்புடையதாகும் [7-10]. பூரியா வழி பொருளான குவானிடீயம் எதிர்மின் அயனி அகன்ற ஹைட்ரஜன் குடும்ப பிணைப்புடன் கூடிய உள்ளடங்க இணை எலக்ட்ரான் உடன் உள்ளதால் அது அதிக NLO பண்புகள் மற்றும் விரைவு ஏற்பு தன்மையுடையதாகிறது [11]. எலக்ட்ரான் இணைப்பு அமைப்பு தரநிலை அல்லது கிளர்ச்சி நிலையில் தேவையான சீரிலா பரவல் எலக்ட்ரானை அதிகரிக்கிறது. மைப்பாதில்லாத இத்தகைய பொருட்களின் வடிவமைப்பு பரிந்துரைப்பது அதாவது ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு கட்டமைப்பு அதிக குறிப்பிடத்தக்க தொழில்நுட்பம் முறையாகிறது [12]. குவானிடீயம்

பல் கூட்டில். குவானிடியம் எதிர்மின் அயனி ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு உள்ளமைப்பை வேறு எலக்ட்ரான் தருகின்ற குழுக்களுடன் உருவாகும் திறனுடையது [13]. கார்பாக்சிலிக் குழுக்களில் உள்ள இருமுனைகுவாடினியம் மீன் எதிர் மோனையுடன் பங்குபெறும் உரு வினை அதிகரிக்கும் திறனுடையது. தற்சமயம் மையப் பாத்தில்லா பொருட்களை ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு குவானிடியம் கார்பனேட் மற்றும் வடிவகரணோரோ அசிடிக் அமிலம் மூலம் பெற தவழர்த்தி குழுவினரால் முயற்சிக்கப்படுகிறது[14]. ஆய்வாளரின் அறிவின்படி DFT கணக்கீடு மூலம் நிறமாலை பகுப்பாய்வு மற்றும் தேற்றம் பகுப்பாய்வுகள் பற்றிய ஆய்வுகள் இதுவரை கண்டறியவில்லை. எனவே குவாண்டம் வேதி கணக்கீடுகள் B 3LYP/6-31G(d,P) அடிப்படை செட் காஸியன் 09 மென்பொருள் மூலம் செய்யப்பட்டது. இந்த ஆய்வானது நிறமாலை ஆய்வுகள் FTIR நிற மாலை மூலமும், ஒளி ஆய்வியல் UV-Vis-NIR நிறமாலைமானி மூலமும் ஆராயப்பட்டது.

கட்டமைப்பு, அதிர்வு பண்பாய்வுகள் முதல் வரிசை மிக முனைவாக்கம் HOMO-LUMO ஆற்றல் பட்டை அகலம் DFT கணக்கீடு மூலம் செய்யப்பட்டது.

2. செய்முறை

AR கிரேடு குவானிடியம் கார்போனேட் மற்றும் டிரை குளோரோ அசிடிக் அமிலம் போன்றவை தலைப்பு உப்பு தொகுக்க பயன்படுத்தப்பட்டது. குவாடினியம் கார்போனேட் மற்றும் டிரை குளோரோ மற்றும் டிரை குளோரைடு 1:1 மோலார் விதத்தில் எடுத்து பின் 1:1 விகிதத்தில் கலக்கப்பட்ட மெத்தனால் மற்றும் அயனி நீக்கப்பட்ட நீரில் கரைக்கப்பட்டு ஒருபடித்தான கலவை ஆகும் வரை நன்கு கலக்கப்படுகிறது. கரைசல் ஆனது வடிக்கப்பட்டு ஆவியாக அளவுக்கு உட்பட்டு பின் 25 நாட்களுக்கு பிறகு தொகுக்கப்பட்ட உப்பு சேகரிக்கப்படுகிறது. மீள் மறுபடியும் ஆக்கள் முறையில் தொகுக்கப்பட்ட உப்பின் தூய்மை மேம்படுத்தப்படுகிறது. தொகுக்கப்பட்ட உப்பு 100 மி.லி கலந்த கரைசலில் கரைக்கப்பட்டு 2 மணி நேரத்துக்கு காந்த கலக்கி மூலம் தெவிட்டிய கரைசல் ஆகும் வரை நன்கு கலக்கப்படுகிறது. தெவிட்டிய கரைசல் கிரேடு வாட்ச்மேன் படித்தால் மூலம் வடிக்கப்பட்டது. வடிகட்டிய கரைசல் அறை வெப்பநிலையில் வைக்கப்படுகிறது. 30 30 நாட்களில் ஊசி வடிவ படிக்கங்கள் 24×4×2 மி.மி³ அளவில் அறுவடை செய்யப்பட்டது. இவ்வாறு வளர்க்கப்பட்ட படிக்கம் ஒன்று படம் 1-ல் கட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 1. வளர்க்கப்பட்ட படிக்கம்

3. பண்பறிதல் :

வளர்க்கப்பட்ட GTCA படிகத்திற்கு ஃப்ரூக்கர் Kuppa APX-1 MoKa கதிர்வீச்சு உடன் கூடிய தனி படிக X-கதிர் விளிம்பு விளைவுமானி ($T=0.71073A^\circ$) படிகத்தின் கட்டமைப்பு கண்டறியப்பட்டது. UV-VIS NIR நிறமாலை யானது Perkin Elmer Lamda 35 மாதிரி நிறமாலை ஒளி மானியில் பதிவிடப்பட்டது.

கணக்கீடு விவரங்கள் :

குவாண்டம் வேதி பகுப்பாய்வு B3LYP/6-31G(d,p) அடிப்படை காஸியன் செட் செயல்திறன் பயன்படுத்தி நிறைவேற்றப்பட்டது. HOMO-LUMO ஆற்றல் இடைவெளி மற்றும் அதன் தொடர்புடைய முழுமை மாறிலிகள் கணக்கிடப்பட்டது. கூப்மேன் தேற்றப்படி [15], HOMO ஆற்றல் ஆனது அயனியாக்க மின்னழுத்தத்தை (IP) தொடர்பாக உதவுகிறது. மேலும் LUMO ஆற்றல் எலக்ட்ரான் ஈர்ப்பை தொடர்பாகிறது. எலக்ட்ரான் ஈர்ப்பு (EA) மின்னெதிரி (χ) எலக்ட்ரான் ஈர்ப்பு குறியீடு (ω) வேதி கடின தன்மை (η) முழுமை மென் (S) தன்மை மேலும் வேதியியல் மின்னழுத்தம் (μ) ஆகியவை கணக்கிடப்பட்டது.

மேலும், வேதியல் மின்னழுத்தம் ஆகியவை கணக்கிடப்பட்டது [16]. GTCAன் முதல் வரிசை மிகை முனைவாக்கம் மொத்த நிலை இரட்டை திருப்புதிறன் மேலும் முனைவாக்கம் மதிப்புகள் [17], ஆகியவைகள் B3LYP அடிப்படை செட் பயன்படுத்தி ஆராய்ச்சிக்கு உட்பட்ட புலன்கள் மூலம் கணக்கிடப்பட்டது.

4 முடிவுகள் மற்றும் விவாதங்கள்

4.1 தனி படிக X-கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்வு:

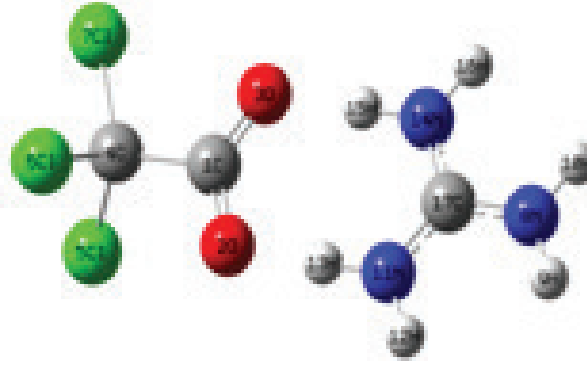
வளர்ந்த GTCA படிகங்கள் தனி படிக X-கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்வுக்குட்படுத்தி படிக கட்டமைப்பு காணப்படுகிறது. GTCA படிக அமைப்பு நாற்கோணம் எனவும் ஓரலகு செல்லுக்கு மூலக்கூறு எண்ணிக்கை 4 எனவும் கண்டறியப்பட்டது.

பெறப்பட்ட ஓர் அலகு செல்லில் மாறிலிகள் ($(2b=7.7551(9)A^\circ$, $C=15.523(3)A^\circ$ ஆகும். அவை ஆய்வறிக்கையின் நெருங்கிய உடன்பாடுடன் உள்ளது என கண்டறியப்பட்டது[14].

4.2 வடிவ கணித கட்டமைப்பு

GTCA கட்டமைப்பு தரவுகள் தனி படிக விளிம்பு விளைவு தொழில்நுட்பத்தில் பெற உள்ளதாக கண்டறியப்பட்டது. சோதனை XRD நிறைவானது கோட்பாட்டியல் கட்டமைப்பை காஸியன் 09 மென்பொருள் செயல் நிழல் தொகுப்பை பயன்படுத்தி பெறப்பட்டது. GTCA ன் உகந்த கட்டமைப்பு அனு குறியீட்டுடன் படம் 2ல் கட்டப்பட்டுள்ளது. மேலும் உகந்த கட்டமைப்பு மாறிலிகள் 6.31G(d,p) அடிப்படை செட் DFT /B3LYP உளம் கணக்கிடப்பட்ட அவை அட்டவணை 1ல் வரிசை படுத்தப்பட்டுள்ளது GTCAல் உள் மூலக்கூறு எதிர்வினை குவானிடியம் எதிர்மின் அயனி மற்றும் டிரை குளோரோ அசிட்டிக் மின் அயனி குழுக்கள் N-H...O ஹைட்ரஜன் பிணைப்பின் வழியாக நடைபெறுகிறது.

குவாடினியத்தில் $3NH_2$ குழுக்கள் உள்ளது அதில் இரண்டாவது உள் மூலக்கூறு ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு உள்ளடக்கியது. GTCAக்கு உள் மூலக்கூறு N-H-O ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு இருப்பதை O-H பிணைப்பு நீளம் $O_2-H_{15}(1.565)A^\circ$ மற்றும் $O_3-H_{15}(1.586)A^\circ$ என்பதை சான்றாக கொண்டு DFT காட்டுகிறது. குவாடினியத்தின் குழுவில் விளைந்த NH_2 வில் உள்ள பிணைப்பு கோணங்கள் $C_{17}-N_{14}-H_{15}$, $C_{17}-N_{14}-H_{14}$ தடிப்பான மாறுபாடுகள் மற்ற உடையாத NH_2 வையும் காட்டுகிறது. இது மிதமான ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு உள்ளதாகும். கணிக்கப்பட்ட பிணைப்பு கோணம் மற்றும் பிணைப்பு நீளங்கள் குவாடினியன் மற்றும் அமில குழுக்கிடையேயுள்ள உள்மூலக்கூறு ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு உள்விளையை காட்டுகிறது. மேலும் அவை சோதனை தரவுடன் ஒப்பிடக்கூடியது.



படம் 2. GTCA கட்டமைப்பு

அட்டவணை 1. GTCA கட்டமைப்பு தரவுகள்

Bonds	Bond length (Å)		Bonds	Bond angle (degree)	
	Theoretical	Experimental		Theoretical	Experimental
C ₁ -O ₂	1.252	1.21(2)	O ₂ -C ₁ -O ₃	129.736	126.7(11)
C ₁ -O ₃	1.249	1.27(2)	O ₂ -C ₁ -C ₄	113.809	118.4(16)
C ₁ -C ₄	1.585	1.496(17)	O ₃ -C ₁ -C ₄	116.456	114.8(15)
C ₄ -Cl ₅	1.806	1.633(15)	C ₁ -C ₄ -Cl ₅	108.568	104.5(11)
C ₄ -Cl ₆	1.806	1.671(16)	C ₁ -C ₄ -Cl ₆	108.562	104.2(10)
C ₄ -Cl ₇	1.792	1.762(14)	C ₁ -C ₄ -Cl ₇	112.678	114.9(12)
N ₈ -H ₉	1.006	0.860	Cl ₅ -C ₄ -Cl ₆	109.191	107.1(10)
C ₁₇ -N ₈	1.359	1.326(3)	Cl ₅ -C ₄ -Cl ₇	108.896	101.5(10)
N ₁₁ -H ₁₂	1.007	0.860	Cl ₆ -C ₄ -Cl ₇	108.896	110.0(10)
N ₁₁ -H ₁₃	1.070	0.860	H ₉ -N ₈ -C ₁₇	121.081	120.02
C ₁₇ -N ₁₁	1.327	1.228(19)	H ₁₀ -N ₈ -C ₁₇	121.126	120.03
N ₁₄ -H ₁₅	1.066	0.860	H ₁₂ -N ₁₁ -H ₁₃	119.654	120.0
N ₁₄ -H ₁₆	1.007	0.860	H ₁₂ -N ₁₁ -C ₁₇	119.771	120.0
N ₁₄ -C ₁₇	1.328	1.409(19)	H ₁₃ -N ₁₁ -C ₁₇	120.576	120.0
O ₂ -H ₁₃	1.565	2.00	H ₁₅ -N ₁₄ -H ₁₆	119.574	120.0
O ₃ -H ₁₅	1.586	2.07	H ₁₅ -N ₁₄ -C ₁₇	120.562	120.0

4.3 FT-IR பகுப்பாய்வு:

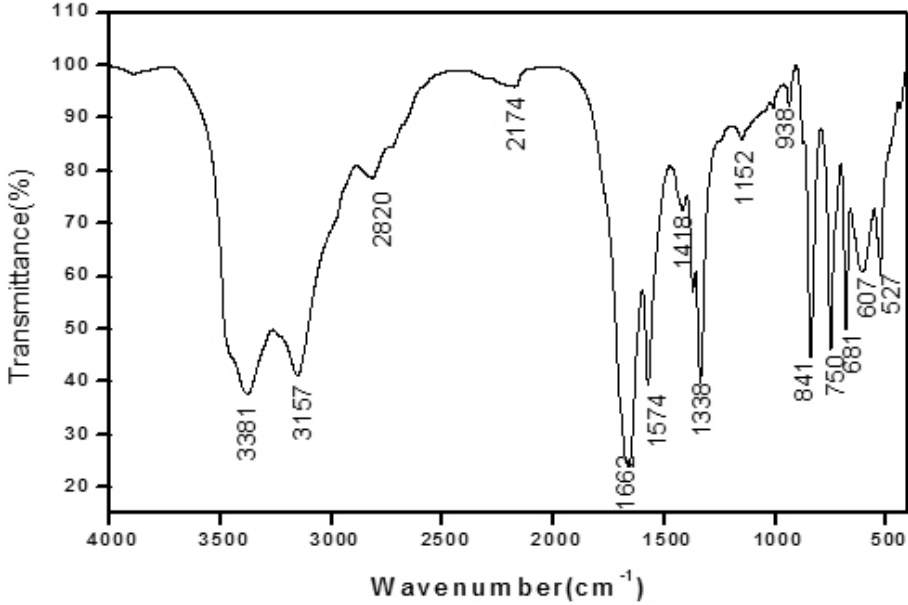
FTIR நிறமாலை 4000 செ. மீ⁻¹ முதல் 400 செ.மீ⁻¹ பகுதியில் பதிவிடப்பட்டது. GTCA படிக பதிவிடப்பட்ட நிறமாலை படம் 3-ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. உணரப்பட்ட அதிர்வெண்கள் மற்றும் ஒப்படைக்கப்பட்ட சார்பு குழுக்கள் அட்டவணை 2-ல் வரிசைப்படுத்தப்பட்டுள்ளது. NH₂ குழுவின் சீரான மற்றும் சீரற்ற நீட்சி அதிர்வுகள் [18] வலிய பட்டைகள்

3390 ± 60 செ. மீ⁻¹ மற்றும் 3210 ± 60 செ. மீ⁻¹ பகுதியில் தருகிறது. GTCA மூலக்கூறில் NH₂-ன் சீரான நீட்சி அதிர்வு 3381 செ. மீ. (வலிய) நோக்கப்பட்டது. குவானியினிய கூட்டின் C=N நீட்சி அதிர்வுகள் அதிகமாக 1685–1580 செ. மீ [19] ல் நோக்கப்பட்டது. இந்த ஆய்வில், இது 1574 செ. மீ⁻¹ ல் உணரப்பட்டது. ஆய்வறிக்கை படி அலிபாடிக் அமைன் கூட்டின் C-N நீட்டிகள் பொதுவாக வலிமையற்றது. மேலும் அவை 1220–1020 செ.மீ. பகுதியில் உருவாகும் [20]. இது 1110 செ.மீ⁻¹ ல் IR நிறமாலையில்

நோக்கப்பட்டது. இடைநிலையிலிருந்து வலிமையற்ற செறிவு பட்டைகள் 600-400 செ. மீ⁻¹ அதிர்வெண் வீச்சில் CNC உருகுலைவு அதிர்வுகளால் [21] ஏற்பட்டது. அவை IR வலிய பட்டை 527 செ.மீ⁻¹ ல் உணரப்பட்டது. C-Cl க்கிடையே உள்ள அதிர்வுகள் முக்கியத்துவம் வாய்ந்தது. ஏனெனில் அதிர்வுகள் கலப்பதானது மூலக்கூறின் சுற்றில் [22] கனமான அணுக்கள் இருப்பதாலும் மூலக்கூற்றின் சீரான தன்மை குறைவதினால் ஆகும். C-Cl நீட்சி அதிர்வுகள் பொதுவாக 750-580 செ.மீ⁻¹ பகுதியில் உள்ள வலிய பட்டையை தருகிறது [23-25]. இது IR ல் வலிய பட்டை 607 செ.மீ⁻¹ ல் உணரப்படுகிறது. CCl₃ பிணைப்பின் சீரற்ற நீட்சி அதிர்வுகள் 841 செ.மீ⁻¹ ல் நோக்கப்படுகிறது [26].

சீரற்ற மற்றும் சீரான கார்பாக்சிலேட் அயனி நீட்சி நிலைகளின் அதிர்வுகள் 1650-1550 செ. மீ. மற்றும் 1440 செ. மீ. வீச்சில்

எதிர்பார்க்கப்படுகிறது [27]. COO- அதிர்வெண் சீரற்ற நீட்சியானது IR ல் 1662 செ. மீ⁻¹ ல் வலிய பட்டையாக தோன்றுகிறது. மேலும் IR ல் சீரான நீட்சி பட்டை 1338 செ. மீ⁻¹ உணரப்படுகிறது. இங்கு வழக்கத்திற்கு மாறான அலை எண் கார்பாக்சிலேட் சீரற்ற நீட்சி குறைவது, ஏற்பான் துணை அலகில் உள்ள CO பிணைப்பு எலெக்ட்ரானை வெளியிடும் விளைவினாளாகும். இந்த எலெக்ட்ரான் வெளியிடல் உள்மூலக்கூறு மின்னோட்ட மாற்றம் மற்றும் இணைப்பு விளைவினாளாகும். அது GTCAன் NLO செயல்பாட்டை உருவாக்குகிறது. COO- அமில குழு உருகுலைவானது பொதுவாக 760-400 செ. மீ. பகுதியில் உருவாவது எதிர்பார்க்கப்படுகிறது [27]. COO- பிணைப்பு வகை 750 செ. மீ⁻¹ ல் மிக வலிய பட்டையாக IR ல் தோன்றுகிறது. அனைத்து அதிர்வு ஒப்படைப்புகளும் GTCA கட்டமைப்பு உருவாக்கத்தையே ஆய்வு செய்ததன் சான்றாகிறது.



படம் 3. FTIR நிறமாலை

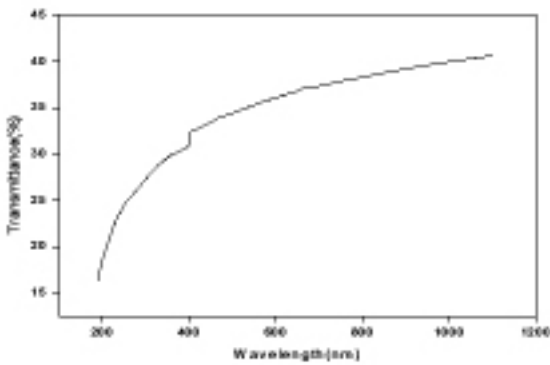
அட்டவணை 2. அதிர்வெண்கள் மற்றும் ஒப்படைக்கப்பட்ட சார்பு குழுக்கள் :

Wavenumber (cm^{-1})	Assignments
3381	asymmetric stretching vibrations of NH_2
3157	symmetric stretching vibrations of NH_2
1662	COO^- asymmetric stretching vibration
1574	C-N asymmetric stretching vibration
1418	C-N symmetric stretching
1338	C-O symmetric stretching vibration
1152	Bending vibrations of NH_2
1110	C-N stretching vibration of aliphatic amine
938	Torsion vibrations of NH_2
841	Asymmetric stretching vibrations of CCl_3
750	COO^- bending vibration
681	NH_2 wagging
607	C-Cl stretching vibration
527	C-N deformation

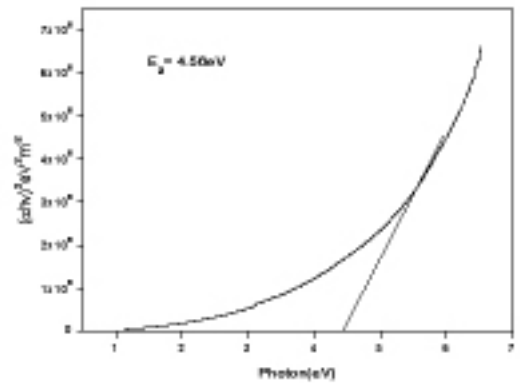
4.4 UV- VIS- NIR நிறமாலை பகுப்பாய்வு:

வளர்ந்த GTCA படிக்கத்தின் UV-VIS-NIR நிறமாலை 190–1100 நானோ மீட்டரில் பதிவு செய்யப்பட்டது. மேலும் நிறமாலைகள் படம் 4-ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. நிறமாலையிலிருந்து எந்த ஒரு உறிஞ்சுதலும் 255 நானோ மீட்டர் க்கு மேல் இல்லை மற்றும் ஊடு கடத்துதிறன் 40% என தெளிவாகிறது. ஆய்வறிக்கையை [14] ஒப்பிடும் பொழுது, குறைந்த வெட்டு நிலை

அலைநீளம் குறைவாகவும் மேலும் குறைந்த சதவீகிதம் ஊடுகடத்து திறனும் கரைப்பானின் விளைவாகும். படம் 5-ல் காட்டியுள்ளபடி, டாக் பிளாட்டில் புறச்செருகல் சீரான பகுதியிலிருந்து ஒளி பட்டை இடைவெளி கணக்கிடப்பட்டது [28]. அது 4.65 eV என கண்டறியப்பட்டது. அனைத்து கட்டிலன் பகுதியிலும் ஒளி ஊடுருவும் தன்மையானது இந்த பொருள் ஒளி எலக்ட்ரானியல் கருவி செய்ய தகுதியானதை உறுதி செய்கிறது.



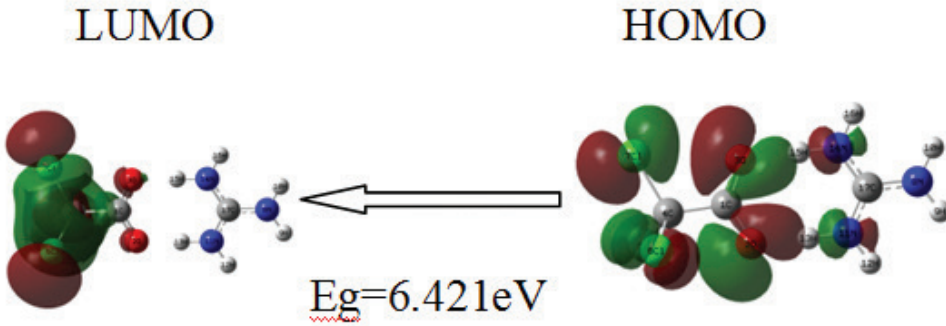
படம் 4, 5. GTCA படிக்கத்தின் UV-VIS-NIR நிறமாலை



4.5 ஃபிரண்டியர் மூலக்கூறு ஆர்ப்பிட்டால் பகுப்பாய்வு:

ஃபிரண்டியர் மூலக்கூறு ஆர்ப்பிட்டால் (HOMO - LUMO) பகுப்பாய்வானது DFT/ B3LYP தகுதியில் செயல்பட்டது. இது எலக்ட்ரானின் மற்றும் ஒளியியல் பண்புகள் மற்றும் வேதி வினைகளை விளக்குகிறது [29]. படம் 6- ல் GTCA ன் ஃபிரண்டியர் மூலக்கூறு ஆர்ப்பிட்டால் நிலைமாற்றமாகும். HOMO- LUMO வரைபடம் மூலக்கூறுகளின் எதிர் வினையின் தன்மை, கட்டமைப்பு மற்றும் இயற்பண்புகளை விளக்குவதாகும். HOMO மற்றும் LUMO இடையே ஆன ஆற்றல் இடைவெளி மூலக்கூறுகளின் இயக்க நிலைத்தன்மை, வேதி எதிர்வினை, மூலக்கூறு முனைவாக்கம், மென்தன்மை மற்றும் கடினத்தன்மை எதிரொளிக்கிறது. குறைந்த ஃபிரண்டியர் மூலக்கூறு ஆர்ப்பிட்டால்

கொண்ட மூலக்கூறுகள் அதிக வேதி எதிர்வினை, குறைந்த இயக்க நிலைத்தன்மை அதிக உள்மூலக்கூறு உள்வினைகளுடையது. இதனால் இந்த மூலக்கூறுகள் மென் மூலக்கூறுகள் எனப்படுகின்றது. அதிக HOMO-LUMO ஆற்றல் இடைவெளியானது வேதி கடினத்தன்மையை காட்டுகின்றது. கணக் கிடப்பட்ட முழுமை விவரிப்புகள் அட்டவணை 3-ல் காட்டப்படுகின்றது. HOMO- LUMO ஆற்றல் இடைவெளி வாயு கட்டத்தில் 6.421 eV என கண்டறியப்பட்டது. இது இணைந்த மூலக்கூறுகள் திட கட்டமதிப்பு 4.5 eV ஐ ஒப்பிடும் பொழுது அதிகமாகும். மென்தன்மை மதிப்பு 0.1557 eV⁻¹ மற்றும் கடினத்தன்மை மதிப்பு 3.2107 eV. எனவே வளர்ந்த படிசம் ஓர் வேதி நிலைத்தன்மை உடைய பொருள் என கணிக்கப்படுகின்றது.



படம் 6. GTCA ன் ஃபிரண்டியர் மூலக்கூறு ஆர்ப்பிட்டால் (HOMO-LUMO)

அட்டவணை 3. ஃபிரண்டியர் மூலக்கூறு ஆர்ப்பிட்டால்

Parameters	B3LYP/6-31G(d,p)
HOMO energy (eV)	-6.6774
LUMO energy (eV)	-0.2561
HOMO-LUMO energy gap (eV)	6.42eV
Ionization potential, IP (eV)	6.6774
Electron affinity, EA (eV)	0.2561
Electronegativity, χ (eV)	3.4667
Chemical hardness, η (eV)	3.2107
Global softness, S (eV ⁻¹)	0.1557
Chemical potential, μ (eV)	-3.4667
Electrophilicity index, ω (eV)	1.8716

4.6. முதல் வரிசை மின்சுமை முனைவாக்கம்:

நிலைத்த NLO பொருளின் மிகைமை முனைவாக்கம் மற்றும் NLO பண்புகளானது ஓர் தனித்த மூலக்கூறுகளால் ஆனது மூலக்கூறு நிறமாலையின் நீட்சிக்கப்பட்ட ஓர் கருவியாகும். முதல் தலைப்பு GTCA கூட்டின் வரிசை முனைவாக்கம் DFT/ B3CYP அடிப்படை செட்டை பயன்படுத்தி கணக்கிடப்பட்டது. அது வரம்புக்குட்பட்ட புலன் அணுகுமுறையாகும்.

மிகைமை முனைவாக்கம், முனைவாக்கம் மற்றும் இருமுனை திருப்புதிறன் அட்டவணை4 -ல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது. இருமுனை திருப்புதிறன் மற்றும் முனைவாக்க மதிப்புகள் சுழியில்லாமல் இருப்பது NLO பண்புகள் உருவாகுவதற்கான மூலமாக திட கட்டத்தில் உள்ளது. முதல் வரிசை வாயு கட்டத்தில் மிகைமை முனைவாக்கம் தர KDP ஐ விட 3.4 மடங்காகும் [10]. இது GTCA கூட்டு திட நிலையில் மேம்பட்ட மிகைமை முனை வாக்கத்திற்கு செல்லத்தக்கதாகும்.

அட்டவணை 4. மிகைமை முனைவாக்கம், முனைவாக்கம் மற்றும் இருமுனை திருப்புதிறன்:

Dipole moment (Debye)	Values	Hyper-polarizability (a.u.)	Values	Polarizability	Values (a.u.)
μ_x	-4.80055	β_{xxx}	-226.2788	α_{xx}	112.0583
μ_y	0.02249	β_{xxy}	23.8711	α_{xy}	1.0239
μ_z	-0.00006	β_{xyy}	-64.0852	α_{yy}	96.0119
μ_{tot}	4.80 Debye	β_{yyy}	-11.4151	α_{xz}	0.0091
		β_{xxz}	-0.0204	α_{yz}	0.0006
		β_{xvz}	-0.0252	α_{zz}	65.6262
		β_{vyz}	-0.0095		
		β_{xzz}	14.3920		
		β_{yzz}	0.8342	α_{tot}	13.52×10^{-24} esu
		β_{zzz}	-0.0103		
		β_{tot}	23.124×10^{31} esu		

முடிவுகள்:

GTCA படிகம் வளர்க்கப்பட்டு பண்பாக்கப்படுகிறது. தனி படிக X- கதிர் விளிம்பு விளைவு பகுப்பாய்வு படிகம் நான்முக கட்டமைப்பு வெளி குழு P4₃ ஆனது என காட்டுகிறது. பதிவு செய்யப்பட்ட FTIR நிறமாலை பகுப்பாய்வு பல்வேறு சார்பு குழு GTCA கூட்டில் உள்ளதை உறுதிசெய்கிறது. UV-VIS- NIR ஒளி ஆய்வு நேரியல் ஒளி தன்மை முதன்மை கூட்டிற்கு எந்த வித உரிஞ்சுதலும் மொத்த கூட்டின் பகுதியில் இல்லை என்பதை வெளிகாட்டுகிறது. உகந்த

வடிவியல் மாறிலிகள் கணக்கிடப்பட்டது. அது GTCA கூட்டு ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு வழிவகை உருவாக்கியதை உறுதி செய்கிறது. DFT கணக்கீடுகளை பயன்படுத்தி குவாண்டம் வேதி பகுப்பாய்வுகள் செய்யப்பட்டது. மேலும் பல்வேறு எலெக்ட்ரானியல் பண்புகள் ஆராயப்பட்டது. HOMO- LUMO ஆற்றல் இடைவெளி மற்றும் அதன் வடிவமைக்கப்பட்ட முழுமை மாறிகள் கணக்கிடப்பட்டது. அனைத்து கணக்கிடப்பட்ட, முழுமை மாறிகளின் மதிப்புகள் முதன்மை கூட்டின் மென் வேதியியல் தன்மையை காட்டுகிறது.

Reference

- [1] Y.R.Shen, The Principles of Nonlinear optics,Wiley, NewYork(1984).
- [2] P.V.Kolinsky,Opt.Eng.31,1676(1992).
- [3] D.F.Eaton,Science,253,281(1991).
- [4] G.Ramasamy,S.Meenakshisundaram,Crystal Growth and Characterization of new non-linear optical material L-isoleusinium picrate, Optik, 125(2014)4422-4426.
- [5] T.Pal, T.Kar, G.Bocelli, L.Rigi, Cryst. Growth Des.,3 (2003) 13.
- [6] B.Gu,Y.H.Wang,X.C.Peng,J.P.Ding,J.I.He and H.T.Wang,Applied Physics,Lett, 85(2004)3687-3689.
- [7] G.Saravanakumar,G.Manobalaji,P.Murugakoothan,Spectrochimica Acta Part A:mol. and Biomol. Spectroscopy,138(2015)340-347.
- [8] A.Suvitha,V.Sathyanarayanamoorthy,P.Murugakoothan,Spectrochimica Acta part A,mol. and Biomol. Spectroscopy,110(2013)255-261.
- [9] V.Sasikala, D.Sajan, K.Jobsabu, T.Arumanayagam, P.Murugakoothan, Spectrochimica Acta Part A:moleand Biomole.Spectroscopy 139(2015)555-572.
- [10] G.Saravanakumar,P.Vivek,P.Murugakoothan,Spectrochimica,Acta Part A: mol. and Biomol. Spectroscopy 145(2015) 417-424.
- [11] V.Sivashankar, R.Siddhesswaran and P.Murugakoothan,Mater.Chem.Phys 130(2011)323
- [12] T.N.Guru Row,Co-ord.ChemRev ,183(1999)81-100.
- [13] P.V.Dhanraj,N.P.Rajesh,G.Vinitha and G.Bhagavannarayana, Mater.Res. Bull.46(2011)726.
- [14] M.Dhavamoorthy, G.Peramaiyan, M.Nizam Mohideen, S.Kalainathan and R.Mohan, J.nonlinear optical Physics and materials,24(4)(2015)1550045(1-14)
- [15] T.A.Koopman,Physica ,1(1993)104-113.
- [16] V.Sasikala, D.Sajan, K.Jobsabu,T.Arumanayagam, P.Murugakoothan, Spectrochimica Acta Part A: moleand Biomole.Spectroscopy 139(2015)555-572.
- [17] D.A.Kleinman, Physical review,126(1962)1977-1979
- [18] N.B.G. Roges, A Guide to the Complex Interpretation of Infrared of Organic Structures, Wiley, New York, 1994.
- [19] G. Socrates, Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies, Tables and Charts, Wiley, Chichester, 2001.

- [20] N.B. Colthup, L.H. Daly, S.E. Wiberly, Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy, Academic Press, New York, 1990.
- [21] F.R. Dollish, W.G. Fateley, F.F. Bentley, Characteristic Raman Frequencies of Organic Compounds, John Wiley & Sons, New York, 1997.
- [22] C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, Physics Review B 37 (1988) 785–789.
- [23] C.S. Hiremath, Tom Sundius, Spectrochimica Acta A 74 (2009) 1260– 1266.
- [24] E.E. Mooney, Spectrochimica Acta 19 (1968) 877–881.
- [25] E.E. Mooney, Spectrochimica Acta 20 (1964) 1021–1024.
- [26] Drozd, M 2008, 'New complexes of guanidine with acetic, trichloroacetic and trifluoroacetic acids: The DFT structural and vibrational investigations', Spectrochimica Acta Part A, vol. 69, pp. 1223-1234
- [27] G. Socrates, Infrared and Raman Characteristic Group Frequencies, John Wiley & Sons Ltd, England, 2001.
- [28] P.Vivek, P.Murugakoothan, Applied Physics A, 115(2014)1139-1146. Acta Part A: mole and Biomole. Spectroscopy 139(2015)555-572.
- [29] C. Parlak, M. Akdogan, G. Yildirim, N. Karagoz, E. Budak, C. Terzioglu, Spectrochimica , Acta Part A, 79(2011)263-271.

குவானிடினியம் 4- ஹைட்ராக்ஸி பென்சோயேட் மோனோ ஹைட்ரேட் படிசுவளர்ச்சி மற்றும் பண்பாய்வுகள்

சு.நந்தினி², ப.முருகக்கூத்தன்^{1,2}

1. முதுகலை மற்றும் இயற்பியல் ஆராய்ச்சி துறை, பச்சையப்பன் கல்லூரி, சென்னை 600 030.

2. இயற்பியல் துறை, சி. கந்தசாமி நாயுடு கல்லூரி, சென்னை-600 102.

ஆய்வுச்சூக்கம்

குவானிடினியம் 4- ஹைட்ராக்ஸி பென்சோயேட் மோனோ ஹைட்ரேட் ஒற்றை படிசுவளர்ச்சி ஆவியாதல் நுட்பத்தின் மூலம் வளர்க்கப்பட்டது. இதன் மூலமுதற் கூறுகள் ஒற்றை X-கதிர் விளிம்பு விளைவு மற்றும் துகள் X-கதிர் விளிம்பு விளைவு சோதனையின் மூலம் உறுதிப்படுத்தப்பட்டது. வளர்ந்த ஒற்றை படிசுவளர்ச்சி ஒளியியல் தரம் புற ஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வு மூலம் கண்டறியப்பட்டது. ஒளியியல் பட்டை இடைவெளி டாக்ஸ் வரைபடம் மூலம் கண்டறியப்பட்டது. இப்படிசுவளர்ச்சி உமிழ்வு தன்மை ஒளிர்ந்தல் ஆய்வின் மூலம் கண்டறியப்பட்டது. வெப்ப பரும அளவிடல் (TG) மற்றும் வகையீட்டு வெப்ப பகுப்பாய்வை (DTA) பயன்படுத்தி வளர்க்கப்பட்ட ஒற்றை படிசுவளர்ச்சி வெப்ப நிலைப்பு தன்மை ஆய்வு செய்யப்பட்டது. விக்கர்ஸ் நுண் கடினத்தன்மை சோதனையிலிருந்து படிசுவளர்ச்சி கடினத்தன்மை மதிப்பிடப்பட்டது. அதிர்வெண்ணை பொறுத்த மின்கடத்தா பண்பின் மாறுபாடு பல்வேறு வெப்பநிலைகளில் ஆராயப்பட்டது. இரண்டாம் சீரிசை உற்பத்தி திறனை குர்ட்ஸ் மற்றும் பெர்ரி நுட்பம் மூலம் கண்டறியப்பட்டது.

1. முன்னுரை

சமீப ஆண்டுகளில் ஒற்றைபடிசுவளர்ச்சியின் மேல் ஆராய்ச்சியாளர்கள் அதிகமாக கவனம் செலுத்து கின்றனர். படிசுவளர்ச்சியானது குறிப்பிடத்தக்க பயன்பாடுகளை வெவ்வேறு துறைகளில் கொண்டுள்ளது. அதனில் சீரொளி தொழில்நுட்பம், ஒளியியல் தொடர்பு மற்றும் ஒளியியல் தகவல் சேமிப்பு ஆகியவற்றில் முக்கிய பங்கு வகிக்கிறது [1]. சீரொளி தொழில்நுட்பத்தின் முன்னேற்றம் மற்றும் புதிய கரிம சார் நேரியல் சாரா ஒளியியல் பொருள் கண்டுபிடிப்பற்கு நேரியல் சாரா ஒளியியல் திடல் அண்மை காலத்தில் பெரும் பங்கு வகிக்கிறது [2].

குவானிடினியம் அயனியின் சிறப்புக்கள்; அமைடு மற்றும் புரதங்களுடன் தொடர்புள்ள குவானிடினியம் அயனி எளிமையான அணுக் கட்டமைப்பை கொண்டது [3]. இந்த அயனி சிறந்த ஹைட்ரஜன் பிணைப்புகளைக் கொண்டது. மேலும் இது படிசுவளர்ச்சி மற்றும் வேதியியல் துறைகளில் குறிப்பிடத்தக்க அயனியாக விளங்குகிறது. இந்த அயனியானது சரியான எதிரயனியுடன் இணையும் போது அதீத நேர்சார்பிலா ஒளியியல் தன்மையினை வெளிப்படுத்துகிறது. குவானிடினியம் அனைத்து விதமான கரிம அமிலத்துடன் உடனடியாக எதிர் விளைவுற்று நல்ல படிசுவளர்ச்சி உருவாக்கும் வல்லமைப் பெற்றது. குவானிடினியம் கலவையில் இருக்கும் ஆறு

ஆற்றல்மிக்க வழங்கி களம் இதன் இணைப்பு தன்னையின் முக்கிய காரணமாக விளங்குகிறது [4]. அண்மை காலங்களில் குவானிடீனியம் அடிப்படையாக கொண்டு பல்வேறு ஒற்றை படிகங்கள் வளர்க்கப்பட்டுள்ளன [5, 6]. இதன் வரிசையில் இக்கட்டுரையில் குவானிடீனியம் 4- ஹைட்ராக்ஸி பென்சோயேட் மோனோ ஹைட்ரேட் ஒற்றை படிகத்தின் தன்மைகள் பற்றி பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டுள்ளது.

2. பொருளாக்கம் மற்றும் படிக வளர்ச்சி

குவானிடீனியம் கார்பனேட் மற்றும் 4-ஹைட்ராக்ஸி பென்சோயிக் அமிலம் ஆகியவற்றை மூலக்கூறாக கொண்டு 1:1 என்ற சதவிகிதத்தில், அயனி நீக்கம் பெற்ற தண்ணீர் மற்றும் மெத்தனாலை கரைப்பானாக கொண்டு உருவாக்கப்பட்டது. இக்கரைசலை வால்ட்மென் வடிகட்டி காகிதத்தை பயன்படுத்தி வடிகட்டப்பட்டது. பின்னர், தயாரிக்கப்பட்ட கரைசல் ஒரு அமைதியான இடத்தில் அறை வெப்பநிலையில் மெதுவாக ஆவியாதல் முறையின் மூலம் 25 நாட்களில் படிகமாக்கப்பட்டது.

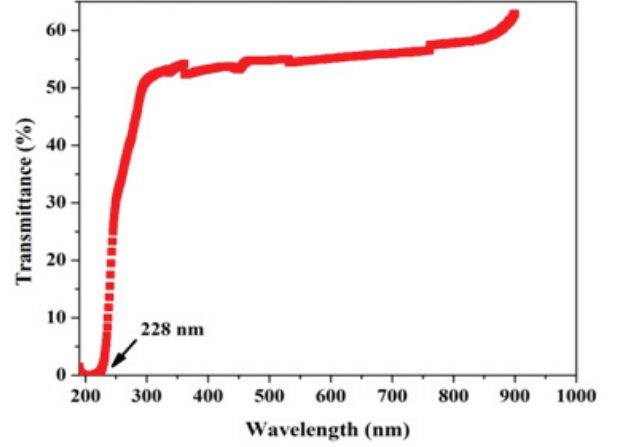
3. முடிவுகள் மற்றும் விவாதங்கள்

3.1 ஒற்றைப் படிக X- கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்வு

ஒற்றைப் படிக X- கதிர் விளிம்பு விளைவு ஆய்வின் மூலம் வளர்ந்த படிகத்தின் அமைப்பு மற்றும் அளவுருகள் கண்டறியப்பட்டது. இவ்வாய்வின் மூலம் இதனுடைய படிக அமைப்பு ஒற்றைசரிவு அமைப்பைச் சார்ந்தது என அறியப்பட்டது. மேலும் இதனுடைய மூலமுதற் கூறு $a = 5.393(9) \text{ \AA}$, $b = 8.677(13) \text{ \AA}$, $c = 11.224(17) \text{ \AA}$ எனவும், முகப்புக்கோணங்கள் $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 94.86^\circ$ எனவும் அறியப்பட்டது.

3.2 புறஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வு வளர்க்கப்பட்ட படிகத்தின் ஒளியியல் வெளிப்படைத் தன்மை புறஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை பகுப்பாய்வின் மூலம் அறியப்பட்டது. இதன் நிறமாலை படம் 1-ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. இவ்வரைப்படத்தின் மூலம் இப்படிகமானது 55 விழுக்காடு ஒளி ஊடுருவும் தன்மையும்,

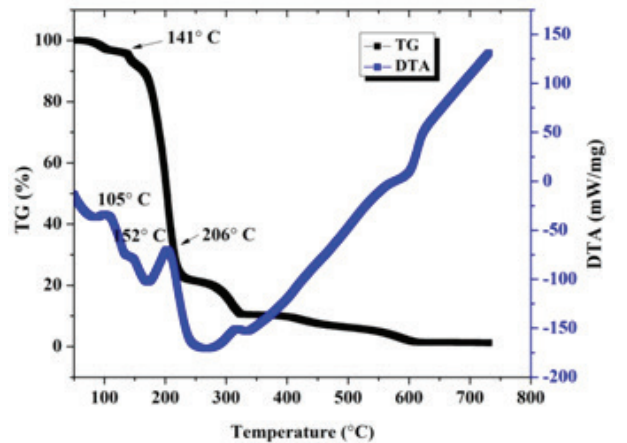
மற்றும் வெட்டு அலைநீளம் 228 மீநுண்ணளவி கொண்டது என அறியப்பட்டது.



படம் 1. GuB படிகத்தின் புறஊதா-கட்புல-அண்மை அகச்சிவப்பு நிறமாலை

3.3 வெப்பப்பகுப்பாய்வு

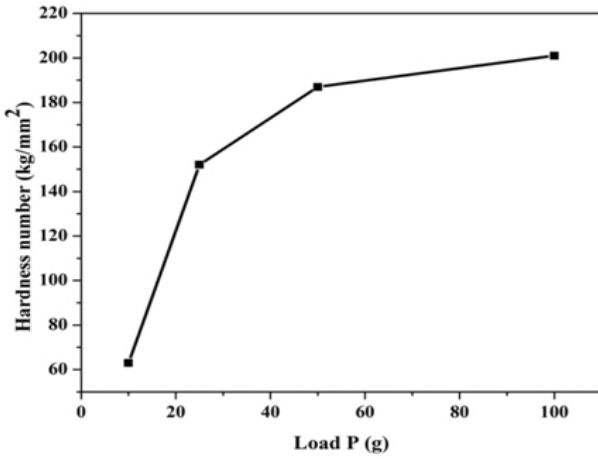
படம் 2 குவானிடீனியம் 4- ஹைட்ராக்ஸி பென்சோயேட் மோனோ ஹைட்ரேட் படிகத்தின் வெப்பப்பகுப்பாய்வு வளைவைக் காட்டுகிறது. வெப்பப்பகுப்பாய்வின் மூலம் இப்படிகம் 105°C வெப்பநிலைத் தாங்கும் உறுதி தன்மைக் கொண்டது என அறியப்படுகிறது.



படம் 2. TG-DTA வளைவு

3.4 விக்ரர்ஸ் நுண்கடினத்தன்மை சோதனை

படிகத்தின் கடினத்தன்மை படிக அமைப்பை சார்ந்துள்ளது. வளர்ந்த படிகத்தின் கடினத்தன்மை விக்ரர்ஸ் நுண்கடினத்தன்மை சோதனை மூலம் கண்டறியப்பட்டது. பளு மற்றும் கண்டறியப்பட்ட விக்ரர்ஸ் விக்ரர்ஸ் நுண்கடினத்தன்மைக்கும் இடையே வரையப்பட்ட படம், படம் 3-ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. படிகத்தின் கடினத்தன்மை பளு அதிகரிக்கையில் அதிகரிக்கிறது. இதன் மூலம் இப்படிகத்தில் தலைகீழ் உள்தள்ளிய அளவு விளைவு (RISE) ஏற்படுவதை அறியமுடிகிறது.

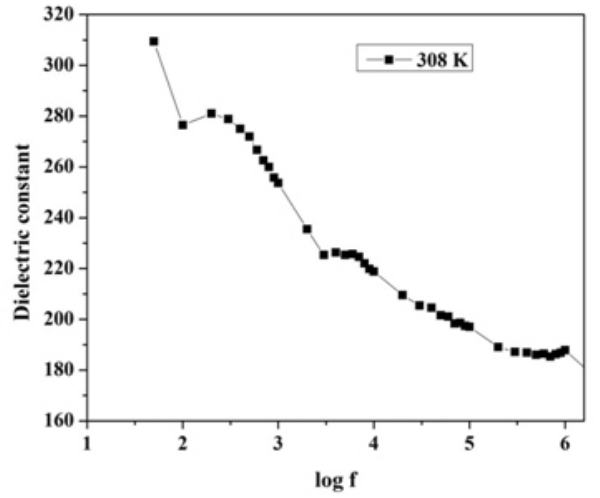


படம் 3. Hv மற்றும் சுமைகளுக்கு இடையிலான வரைபடம்

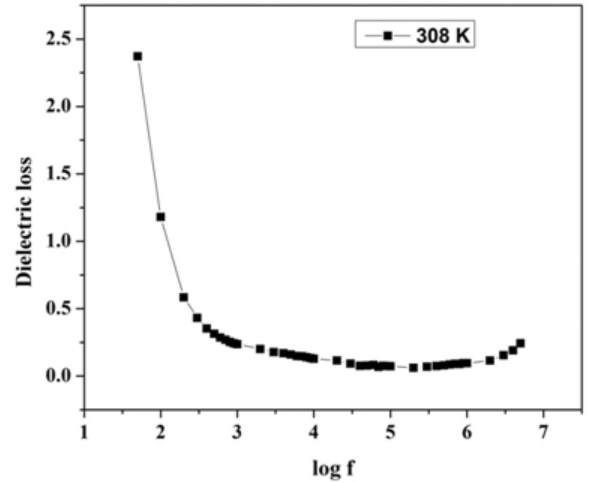
3.5 மின்கடத்தா தன்மையின் ஆய்வு

இப்படிகத்தின் மின்கடத்தா தன்மையினை மின்கடத்தா மாறிலி மற்றும் மின்கடத்தா இழப்பு ஆகியவற்றின் மூலம் அறியப்பட்டது.

இதன் வரைபடம் படம் 4-இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. கண்டறியப்பட்ட மின்கடத்தா மாறிலி, மின்கடத்தா இழப்பு மதிப்புகள் அதிர்வெண் அதிகரிக்கும் போது குறைகிறது. இந்த ஆய்வின் மூலம் இப்படிகத்தை ஒளிமின் சாதனங்களுக்கு பயன்படுத்தலாம் என அறியப்படுகிறது.



படம் 4. மடக்கை அலைவரிசை மற்றும் மின்கடவா நிலை தொடர்பு



படம் 5. மடக்கை அலைவரிசை மற்றும் மின்கடவா இழப்பு தொடர்பு

3.6 நேர் சார்பிலா ஒளியியல் ஆய்வு

குர்ட்ஸ் மற்றும் பெர்ரி நுட்பம், இரண்டாம் சீரிசை உற்பத்தி திறனை கண்டறிய ஏற்பத் தக்கது [7]. தற்போதைய ஆய்விற் கான குறிப்பு பொருளாக KDP பயன்படுத்தப்பட்டது. இந்த ஆய்வின் முடிவில் வளர்க்கப்பட்ட குவானிடினியம் 4- ஹைட்ராக்ஸி பென்சோயேட் மோனோ ஹைட்ரேட் படிகமானது குறிப்பு பொருளை விட 3 மடங்கு இரண்டாம் சீரிசை உற்பத்தி திறனைக் கொண்டதாக விளங்குகிறது.

4. முடிவுரை

ஒற்றைக் கரிம படிமமான குவானிடீனியம் 4-ஹைட்ராக்ஸிபென்சோயேட் மோனோ ஹைட்ரேட் மெதுவாக ஆவியாதல் நுட்பத்தின் மூலம் வளர்க்கப்பட்டது. X- கதிர் வீச்சு சோதனையின் மூலம், இதனுடைய படிம அமைப்பு ஒற்றைசரிவு அமைப்பைச் சார்ந்தது என அறியப்பட்டது. ஒளியியல் ஆய்வின் மூலம் 55 விழுக்காடு ஒளி ஊடுருவும் தன்மையும், குறைவான திருப்பு அலைநீளம் 228 மீநுண்ணளவி கொண்டது

என அறியப்பட்டது. வெப்பக்குப்பாய்வின் மூலம் இப்படிமம் 105°C வெப்பநிலைத் தாங்கும் உறுதி தன்மைக் கொண்டது என அறியப்படுகிறது. கடினத்தன்மை சோதனை தலைகீழ் உள்தள்ளிய அளவு விளைவு (RISE) படிமத்தில் ஏற்பட்டதை அறிய முடிகிறது. குறைவான மின்கடவா எண், மின்கடவா தன்மையிழப்பு, இப்படிமத்தைச் சிறந்த ஒளியியல் படிமமாகப் பயன்படுத்தலாம் என அறிவுறுத்துகிறது. நேர் சார்பிலா ஒளியியல் ஆய்வு மூலம் இரண்டாம் சீரிசை உற்பத்தி திறனைக் கொண்டதாக விளங்குகிறது.

Reference

- [1] D.S. Chemla, J. Zyss, Nonlinear Optical Properties of Organic Molecules and Crystals, Academic Press, New York, (1987).
- [2] P. Prabu, B. Vijayabhaskaran, G. Vasuki, C. Ramachandra Raja, Opt Laser Technol 98, (2018) 12-18.
- [3] A.M. Petrosyan, R.P. Sukiyasan, H.A. Karpetyan, S.S. Tenzya, R.S. Feigelson, J. Cryst. Growth 213, (2000) 103-111.
- [4] Beenish Bashir, Bingbing Zhang, Bing-Hua Lei, Zhihua Yang, Ming-Hsien Lee Shilie Pan, Cryst, Growth Des. 16, (2016) 5067-5073.
- [5] T. Arumanayagam, P. Murugakoothan J. Cryst. Growth 362 (2013) 304-307
- [6] V. Sivashankar, R. Siddheswaran, P. Murugakoothan Mater. Chem. Phys. 130 (2011) 323- 326
- [7] K. Kurtz, T. T. Perry, J. Appl. Phys. 36 (1968) 3798.

இயற்பியல் வேதியியல் பண்புகள் கொண்ட நேரியல்சாரா ஒளியியல் ஒற்றை படிசு: எத்தீலீன்டை அமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட்

கொ. சுதாகர்¹, ப. முருகக்கூத்தன்^{1, 2*}

1 முதுஅறிவியல் மற்றும் ஆராய்ச்சி இயற்பியல் துறை, பச்சையப்பன் கல்லூரி, சென்னை - 600 030.

2 இயற்பியல் துறை, சி. கந்தசாமி நாயுடு ஆடவர் கல்லூரி, சென்னை - 600 102.

* ஏற்புடைய எழுத்தாளர் மின்னஞ்சல்: murugakoothan03@yahoo.co.in

ஆய்வுச்சுருக்கம்

கரிம நேரியல்சாரா ஒளியியல் படிசுமான எத்தீலீன்டை அமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட் ஒற்றை படிசுமானது அயனி நீக்கம் பெற்ற நீர் உதவியுடன் மெதுவாக கரைசல் ஆவியாதல் நுட்பத்தில் வளர்க்கப்பட்டது. படிசு அமைப்பு மற்றும் இடத்தொகுப்பு ஆகியவை ஒற்றை படிசு X-கதிர் விளிம்பு விலகல் பகுப்பாய்வு உறுதிப்படுத்துகிறது. பல்வேறு செயல்பாட்டு குழுக்களின் அதிர்வு அதிர்வெண்களை கண்டறிய ஃபூரியர் கட்டமாறுபாடு அகசிவப்பு பகுப்பாய்வு பயன்படுத்தப்பட்டது. ஒளியியல் வெளிப்படைத்தன்மையினை வெளிக்கொணர புறஊதா - கட்புல - அருகு அகசிவப்பு அருகில் ஊடுகடத்துத்திறன் ஆய்வு மேற்கொள்ளப்பட்டது. வெப்ப நிலைப்புத்தன்மை, உருகுநிலை மற்றும் வெப்ப சிதைவு ஆகியவற்றை கணக்கிட வெப்பவிய எடை அளவறி - வெப்ப வேறுபாட்டுப் பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது. படிசுத்தின் கடினத்தன்மையினை விக்கர்ஸ் நுண்கடினத்தன்மை சோதனையினால் பெறப்பட்டது.

குறிப்புச்சொற்கள்: கரிம படிசு, படிசு வளர்ச்சி, ஒளியியல் வெளிப்படைத்தன்மை, வெப்ப நிலைப்பு, கடினத்தன்மை.

1. முகவுரை

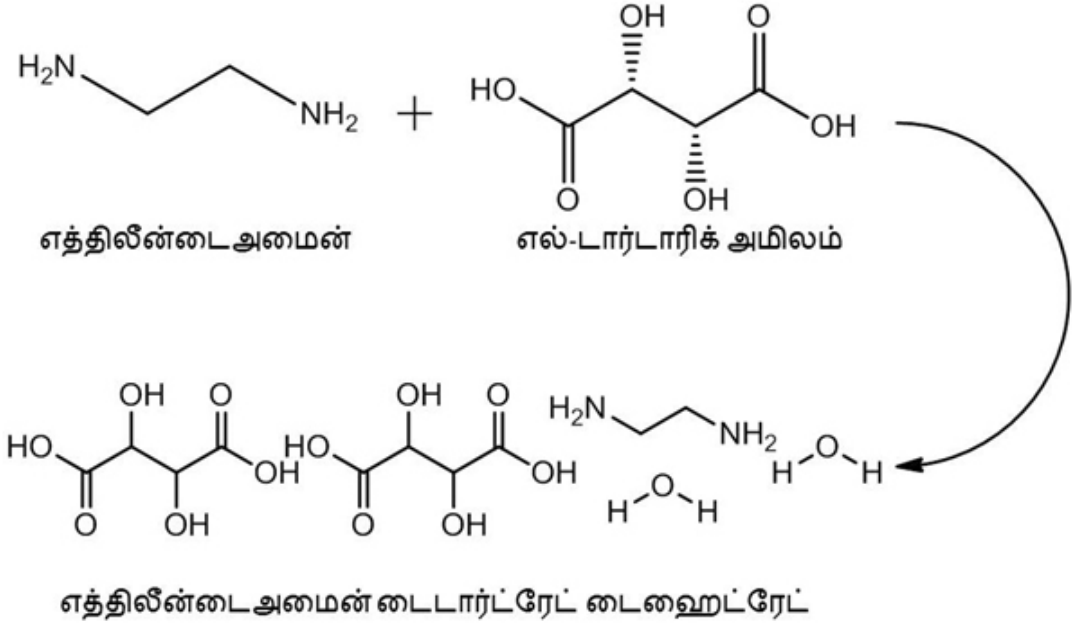
அண்மை ஆண்டுகளில், பல ஆராய்ச்சி யாளர்கள் மற்றும் விஞ்ஞானிகள் ஒளியியல் சாதன பயன்பாடுகளுக்கு தொழில்நுட்ப ரீதியாக உதவக்கூடிய நேரியல்சாரா ஒளியியல் படிசுகளை வளர்க்க ஆர்வம் காட்டினர். இரண்டாம் மற்றும் மூன்றாம் சீரிசை உற்பத்தி, ஒளியியல் இருநிலைத்தன்மை, கிளர்க்கதிர் தொலைவிட உணர்தல், ஒளியியல் வட்டு தரவுத் தேக்கம், மருத்துவ மற்றும் அலைமாலை கிளர்க்கதிர் ஆகியவற்றின் பயன்பாடுகளுக்கு நேரியல்சாரா ஒளியியல்

படிசுங்கள் பயன்படுத்தப்பட்டு வருகின்றன [1]. கரிம சேர்மங்கள் பெரும்பாலும் பலவீனமான வான் டெர் வால்ஸ் மற்றும் ஹைட்ரஜன் பிணைப்புகளால் உருவாகின்றன மற்றும் அதிக அளவு உயர்தர உள்ளடங்கை கொண்டுள்ளன. டார்ட்ரேட்டுகளின் புலனாய்வு பலவிதமான தாக்கத்தை உருவாக்குகிறது. ஏனெனில் அதன் சமச்சீர் கட்டமைப்பு மற்றும் சமச்சீரியில்லா சில கரிம மூலப்பொருட்களுடன் ஒருங்கிணைக்கும் திறனை கொண்டுள்ளது [2]. பலதிசையுறு ஹைட்ரஜன்பிணைப்புப்பட்ட டார்ட்ரேட் எதிரயனி, நேரயனி இணைந்து சமச்சீரியில்லா படிசுகளை உருவாக்குவதற்கு ஒரு இணக்கமான சூழலை

வழங்குகின்றன. மின்கடத்தா, அழுத்த மின்சார, இரும்பு மின்சார மற்றும் ஒளியியல் இரண்டாம் சீரிசை உற்பத்தி போன்ற பல சுவாரஸ்யமான இயற்பியல் பண்புகள் காரணமாக பல டார்ட்ரேட் சேர்மங்கள் சிறப்பு கவனம் செலுத்த வேண்டியவை [3]. விரிவான குணாதிசயத்தின் ஒரு பகுதியாக, மெதுவாக ஆவியாதல் நுட்பத்தால் வளர்க்கப்பட்ட படிமமானது, X-கதிர் விளிம்பு விலகல், ஒளியியல், வெப்ப மற்றும் இயந்திர நிலைப்புத்தன்மை பகுப்பாய்வு போன்ற புலனாய்வை இந்த கட்டுரையில் முன்வைக்கிறோம்.

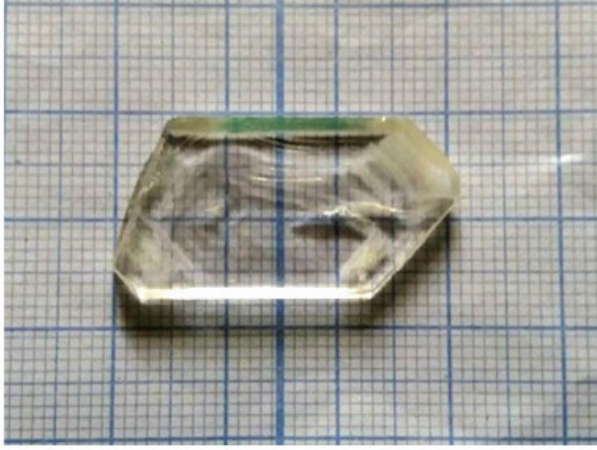
2. மூலப்பொருட்களின் தொகுப்பு மற்றும் வளர்ச்சி

எத்திலீன்டைஅமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட் ஒற்றை படிமமானது மெதுவாக ஆவியாதல் நுட்பத்தால் வளர்க்கப்பட்டது. பின்வரும் வேதிவினை 1:1 என்ற விகிதத்தில் எத்திலீன்டைஅமைன் மற்றும் எல்-டார்டாரிக் அமிலம் எடுத்துக்கொள்வதன் மூலம் இந்த படிமமானது ஒருங்கிணைக்கப்பட்டுள்ளது. இதன் வேதிவினை பின்வருமாறு,

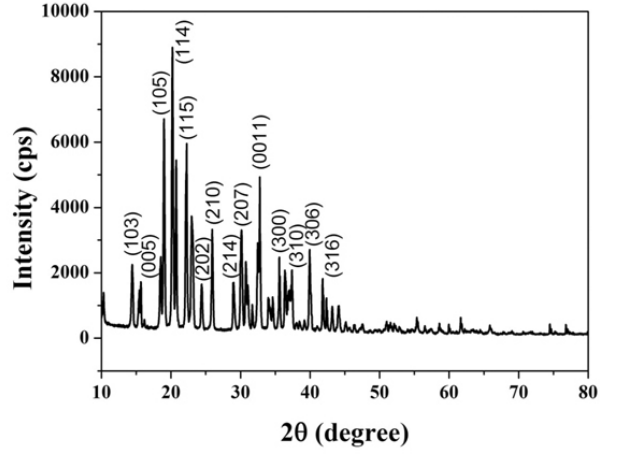


தொடக்க மூலப்பொருளை தேவையான அளவு கணக்கிடப்பட்டு அயனி நீக்கம் பெற்ற நீரில் கரைக்கப்பட்டது. இவ்வாறாக தயாரிக்கப்பட்ட கரைசல் அறை வெப்பநிலையில் உலர வைக்கப்பட்டது. பின்னர் உலர்ந்த படிமம் பெறப்பட்டது. மேலும் பதிகத்தின் தரத்தினை

உயர்த்த மறுபடிமமாக்கல் செயல்முறை பயன்படுத்தப்பட்டது. இக்கரைசலை வடிக்கட்டி மற்றும் துளை இடைப்பட்ட பாலிதீன் காகிதத்தை பயன்படுத்தி மெதுவாக ஆவியாதல் நுட்பம் செயல்பட அனுமதிக்கப்பட்டது. இவ்வாறு பெறப்பட்ட படிமம் படம் 1 ல் காட்டப்பட்டுள்ளது.



படம் 1 எத்திலீன்டைஅமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட் படிக்கம்



படம் 2 எத்திலீன்டைஅமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட் படிக்கத்தின் துகள் X-கதிர் விளிம்பு விலகல்

3. முடிவுகள் மற்றும் விவாதங்கள்

3.1 ஒற்றை படிக்க X-கதிர் விளிம்பு விலகல் பகுப்பாய்வு

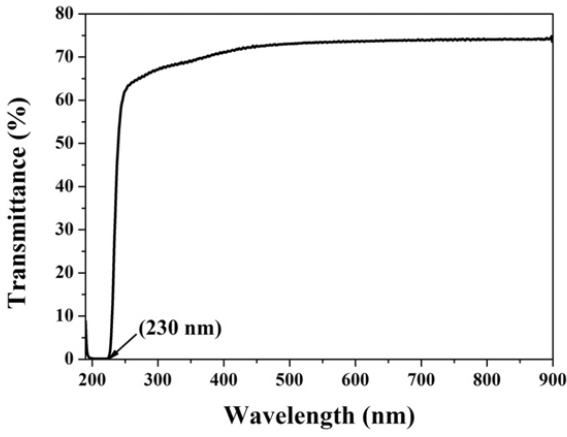
அலகுக் கூட்டின் அளவுரு, இடத்தொகுப்பு மற்றும் படிக்க அமைப்பு ஆகியவற்றை மதிப்பிடுவதற்காக வளர்ந்த படிக்கத்தை ஒற்றை படிக்க X-கதிர் விளிம்பு விலகல் பகுப்பாய்வு உட்படுத்தப்பட்டது. வளர்ந்த படிக்கமானது நான்முக அமைப்புக்கு உட்பட்டது, மேலும் இடத்தொகுப்பு P4₁2₁2 குறிக்கிறது [4].

3.2 துகள் X-கதிர் விளிம்பு விலகல் பகுப்பாய்வு

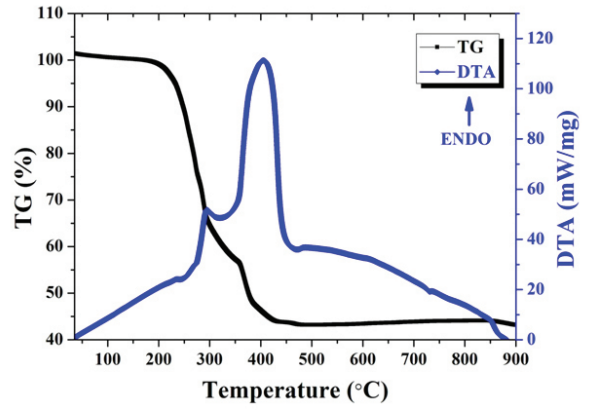
துகள் X-கதிர் விளிம்பு விலகல் பகுப்பாய்வின் மூலம் நன்கு துகளாக்கப்பட்ட படிக்கம் ஆய்வு செய்யப்பட்டது. 2 பாகை வரம்பில் 10 முதல் 80 பாகை வரை 0.02 பாகை/நிமிடம் வேகத்தில் பதிவு படுத்தப்பட்டது. வளர்ந்த படிக்கத்தின் பதிவு துகள் X-கதிர் விளிம்பு

3.3 ஒளியியல் ஊடுகடத்துத்திறன் ஆய்வு

ஒளியியல் வெளிப்படைத்தன்மையின் வரம்பு மற்றும் அதன் கீழ்வெட்டு அலைநீளம் ஆகியவை ஒளியியல் மூலப்பொருட்களுக்கு முக்கியத்துவம் வாய்ந்தது. பிளம்எம் படிக்கத்தின் புறஊதா-கட்புல-அருகு அகசிவப்பு ஊடுகடத்துத்திறனின் நிறமாலை படம் 3 ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. இப்படிக்கம் 63விழுக்காடுநல்ல வெளிப்படைத்தன்மை கொண்டுள்ளது. மேலும் இது 210nm கீழ்வெட்டு அலைநீளம் கொண்டது. கட்புல மற்றும் அகசிவப்புக்கு அருகில் உள்ள பகுதிகளில் ஒளியியல் உட்கொள்ளலானது பெரும்பான்மையாக மறுக்கப்பட்டுள்ளது. முழுமையான கட்புல மற்றும் அகசிவப்புக்கு அருகில் உள்ள மண்டலங்களில் ஒளியியல் மற்றும் ஒளிமின்னணுவியல் பயன்பாடுகளுக்கு சாத்தியமான பணியை நிறைவு செய்யவல்லதாக இந்த படிக்கம் இருக்கும்.



படம் 3 எத்திலீன்டைஅமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட் படிசுத்தின் புறஊதா-கட்புல-அருகு அகச்சிவப்பு நிறமாலை



படம் 4 எத்திலீன்டைஅமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட் படிசுத்தின் வெப்ப நிலைப்புத்தன்மை

3.4 வெப்ப பகுப்பாய்வு

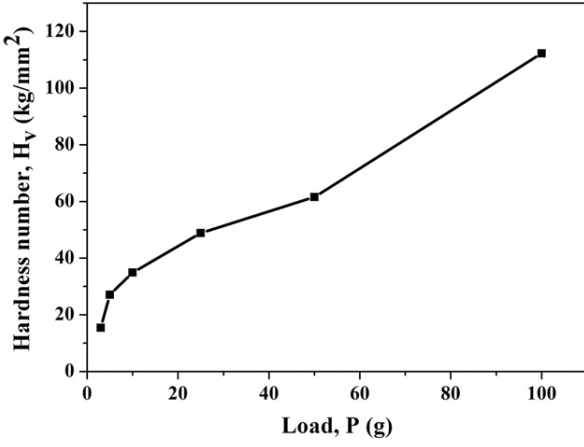
வெப்ப எடை அளவறி - வெப்ப வேறுபாட்டுப் பகுப்பாய்வு ஆகியவை படிசுத்தின் வெப்ப பண்புகளுக்கு மிகவும் மிகவும் அவசியமான ஆய்வாகும். இப்படிசுதின் நைட்ரஜன் வளிமண்டலத்தில் 35 முதல் 900 செல்சியஸ் வெப்பநிலை வரம்பில் 10 பாகை செல்சியஸ்/நிமிடம் இடைவெளியில் பதிவுசெய்யப்பட்டது. படிசுத்தின் வெப்ப எடை அளவறி - வெப்ப வேறுபாட்டுப் பகுப்பாய்வு படம் 4 ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. வெப்ப வேறுபாட்டுப் பகுப்பாய்வு வளைவிலிருந்து வெப்ப உட்கொள்ளல் 202 பாகை செல்சியஸ் லிருந்து தொடங்குகிறது, இது வெப்ப எடை அளவறி வரைபடத்தில் காணப்பட்ட எடை இழப்புடன் வெப்ப உட்கொள்ளல் ஒத்துப்போதலால் படிசுதின் சிதையுற காரணமாகிறது. வெப்ப பகுப்பாய்விலிருந்து படிசுதின் 202 பாகை செல்சியஸ் வரை வெப்ப நிலைப்புத்தன்மை வரையறுக்கப்பட்டது.

3.5 நுண்கடினத்தன்மை ஆய்வு

படிசுத்தின் கடினத்தன்மை சாதனங்களின் கட்டமைப்பில் முக்கிய பங்கு வகிக்கிறது [5]. கடினத்தன்மையானது முதன்மையாக படிசு அமைப்பை சார்ந்துள்ளது. தற்போதைய ஆய்வில் கடினத்தன்மை பகுப்பாய்வுக்கு 3 முதல் 100 கிராம் வரை உள்ள அனைத்து பளுவிற்கும் 10 வினாடிகளுக்கு பதிவானது செய்யப்பட்டது. ஒவ்வொரு பளுவிற்கும் விக்ரர் கடினத்தன்மையின் மதிப்பு கீழ்க்காணும் சூத்திரத்தை பயன்படுத்தி கணக்கிடப்பட்டது.

$$H_v = 1.8544 \left(\frac{P}{d^2} \right) \text{ kg mm}^{-2}$$

இதில் P என்பது செயல்முறை சார்ந்த பளு (கிராம்) மற்றும் ன என்பது மூலைவிட்ட நீளம் (மீ) ஆகும். பளு மற்றும் அதனுடன் தொடர்புடைய கடினத்தன்மைக்கும் இடையே வரையப்பட்ட படம் 4 -ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. படிசுத்தின் கடினத்தன்மை பளு அதிகரிக்கையில் அதிகரிக்கிறது. இது தலைகீழ் உள்ளீடு அளவு விளைவைக் குறிக்கிறது [6].



படம் 5 எத்திலீன்டைஅமைன் டைடார்ட்ரேட் டைஹைட்ரேட் படிக்கத்தின் நுண்கடினத்தன்மை

4. முடிவுரை

மெதுவாக ஆவியாதல் நுட்பத்தால் நேரியல் சாரா ஒளியியல் கரிம படிக்கமானது வெற்றிகரமாக

வளர்க்கப்பட்டது. ஒற்றை படிக்க X-கதிர் விளிம்பு விலகல் ஆய்வு வளர்ந்த படிக்கத்தின் இடத்தொகுப்பு P4₁2₁2 எனவும் படிக்கத்தின் வடிவமைப்பு நான்முக வடிவம் என நிரூபணம் செய்யப்பட்டது. துகள் X-கதிர் விளிம்பு விலகல் பகுப்பாய்வானது படிக்கத்தன்மையுடன் படிக்கம் உள்ளது என்பதை வெளிக்காட்டுகிறது. நேரிய ஒளியியல் பண்புகளை ஆய்வு செய்து படிக்கம் நல்ல ஒளியியல் ஊடுகடத்துத்திறன் உடையது என்று நிரூபிக்கப்பட்டது. வெப்ப பகுப்பாய்வானது படிக்கம் உயர் வெப்ப நிலைப்புத்தன்மை கொண்டுள்ளதை வெளிப்படுத்துகிறது. வளர்ந்த படிக்கத்தின் கடின நிலைப்புத்தன்மை அறிந்து கொள்ள விக்ஃர்ஸ் நுண்கடினத்தன்மை கணக்கிடப்பட்டது. மேற்கண்ட முடிவுகளின் அடிப்படையில் படிக்கம் ஒளிமின்னணுவியல் மற்றும் ஒளியியல் கருவிகளில் பயன்படுத்தலாம் என அறிவுறுத்தப்படுகிறது.

பார்வைக்குறிப்பு

- [1] T. P. Srinivasan, R. Indirajith, R. Gopalakrishnan, J. Cryst. Growth, 312 (2010) 542-547.
- [2] R. Nagalakshmi, V. Krishnakumar, N. Sudharsana, A. Wojciechowski, M. Piasecki, I. V. Kityk, Michael Belsley, DmitryIsakov, Physica B 406 (2011) 4019-4026.
- [3] M. K. Marchewka, S. Debrus, A. Pietraszko, A. J. Barnes, H. Ratajczak, J. Mol. Struct. 656 (2003) 265-273.
- [4] Serge Perez, Acta Crystallogr. B, 33 (1977) 1083-1087.
- [5] K.K. Rao, D.B. Sirdeshmukh, Bull. Mater. Sci. 5, 449-452 (1983)
- [6] K. Sangwal, Mater. Chem. Phys. 63, 145-152 (2000).

நேருறா ஒளியிழைகளில் சாலிட்டான்கள்

முனைவர் ப. சண்முக சுந்தரம், M.Sc., M.Phil., Ph.D.

உதவிப்பேராசிரியர், முதுகலை மற்றும் ஆராய்ச்சி இயற்பியல் துறை
திரு. கொளஞ்சியப்பர் அரசு கலைக்கல்லூரி (தூம் - 1) விருத்தாசலம் - 606 001
மின்னஞ்சல்: shanmugha@yahoo.com <mailto:shanmugha@yahoo.com>
கைபேசி எண்: +91-9841311274

ஆய்வுச்சுருக்கம்

இக்கட்டுரையில், தகவல் தொழில்நுட்பத் துறையின் வியத்தகு வளர்ச்சிக்கு முக்கிய பங்காற்றும் சாலிட்டான்கள் பற்றி விளக்கப்பட்டுள்ளது. அதிலும், நேருறா ஒளியிழைகளில் சாலிட்டான்கள் பயணிக்க ஏதுவான சூழ் நிலைகள் பற்றி விளக்கப்பட்டுள்ளது. நாளுக்கு நாள் வளர்ச்சி கண்டுவரும் தகவல் தொழில்நுட்பத்துறையில் இக்கட்டுரையானது, ஒரு சிறு பங்களிப்பாகும்.

1. முன்னுரை

சமீப காலங்களில், தகவல் தொடர்பு தொழில்நுட்பத்தில், நேருறா அலை பற்றிய ஆய்வானது வியத்தகு வளர்ச்சி அடைந்துள்ளது. இதுவரை, எளிதில் தீர்வுகாணக்கூடிய நேருறு அமைப்புகள் இத்தொழில்நுட்பத்தினை ஆட்கொண்டன. ஆனால், உயர்வேக கணிப்பொறி மற்றும் அதி நவீன கணத முறைகளின் வருகைக்குப்பின், விஞ்ஞானிகள் தங்கள் கவனத்தினை நேருறா அமைப்புகள் மீது செலுத்தினர். நேருறா அமைப்புகளின் சிறப்பம்சங்களின் ஒன்றாக சாலிட்டான்கள் விளங்குகின்றன. சாலிட்டான்கள் என்பவை, ஓர் ஊடகத்தினுள்ளே, திசைவேகம் மற்றும் வீச்சில் எவ்வித மாற்றமும் அடையாமல் பயணிக்கும் தனித்தன்மை வாய்ந்த அலைகள் ஆகும். ஒன்றுக்கொன்று மோதிக் கொண்ட பின்னும் தங்கள் வடிவத்தில் யாதொரு மாற்றமடையாமல் துள்களை ஒத்த பண்புடையவை ஆகும். .

சாலிட்டான்கள் பற்றிய ஆய்வுக்கூட சோதனை விளக்கமானது, முதன்முதலில் லேசர் கருவியின் வருகைக்குப் பின்னரே அளிக்கப்பட்டது. ஒளியிழைகளில் செய்தித் தொடர்பில் பல்வேறு வெற்றிகரமான சோதனைகளுக்குப் பின், நெடுநாள் கனவான ஆழ்கடல் வழித் தகவல் தொடர்பமைப்பானது வடிவமைக்கப்பட்டது.

செலுத்தப்படும் துடிப்பு சமிஞ்சையின் செறிவினைப்பொறுத்து, ஒளியிழையானது நேருறு விளைவுகளை மட்டும் அல்லது நேருறு மற்றும் நேருறா விளைவுகளைச் சேர்த்து கொண்டிருக்கும். செலுத்தப்படும் துடிப்பு சமிஞ்சையின் செறிவானது குறைவாக இருக்குமேயானால், பிரிகை மற்றும் சமிஞ்சையில் ஏற்படும் ஒளி இழப்புகளைக்கொண்ட நேருறு விளைவுகள் மட்டுமே ஒளியலையின் இயக்கத் தினை அறிய பங்களிப்பவை. மாறாக, லேசர் போன்ற அதிக ஒத்திசைவு கொண்ட துடிப்பு சமிஞ்சையானது ஓர் ஒளியிழையில் செலுத்தப்படும்போது, நேருறு

விளைவுகளுடன் நேருறா விளைவுகளும் ஒளியலையின் இயக்கத்தினை தீர்மானிக்கும்.

2. ஒளியியழைகளில் நேருறு விளைவுகள்

ஒர் ஒளியமைப்பில், நேருறு விளைவுகளை விளைவிக்க ஏதுவாக இருப்பது, ஒளியமைப்பின் ஒளிவிலகல் எண் (n) சார்ந்த நேருறு ஏற்புத்திறன் $C^{(1)}$ ஆகும்.

$$n = \sqrt{1 + \chi^{(1)}}$$

பொதுவாக, ஒளிவிலகல் எண் ஆனது ஒளி அதிர்வெண் (ω) சார்ந்த ஒரு சிக்கல்கணியமாகும். ஒளிவிலகல் எண்ணின் மெய் மற்றும் கற்பனைப்பகுதிகள், முறையே பிரிகை விளைவுகள் மற்றும் ஒளி இழப்புகளில் பங்கு வகிக்கின்றன.

ஒர் அலை வழிகாட்டியில் செலுத்தப்படும் போது, ஒளிச்சமிஞ்சையானது பிரிகையினால் விரிவடைகிறது. இந்த ஒளிச்சமிஞ்சையானது ஃபூரியர் ஆக்கக்கூறுகளாலான நிறமாலையைக் கொண்டுள்ளது. வெவ்வேறு ஃபூரியர் ஆக்கக்கூறுகள் வெவ்வேறு திசைவேகத்தில் பயணிப்பன. ஒளிச்சமிஞ்சையின் ஒட்டுமொத்த திசைவேகமானது குழுமத் திசைவேகம் எனப்படும். இந்த குழுமத் திசைவேகத்தினால் ஒளிச்சமிஞ்சையானது காலத்தைப்பொறுத்து விரிவடைவதனால், இந்த விளைவானது குழுமத்திசைவேகப்பிரிகை என்றழைக்கப்படுகிறது.

பயன்படுத்தப்படும் ஒளியியழையினைப் பொறுத்து, பிரிகையானது உள்வழிப்பிரிகை மற்றும் இடைவழிப்பிரிகை என இரு வகைப்படும். உள்வழிப்பிரிகையானது ஒற்றை வழி ஒளியியழைகளுக்கு மட்டுமே பொறுந்தும். சாலிட்டான் பயணமானது ஒற்றை வழி ஒளியியழைகளில் தான் பெரும் பாலும் சாத்தியமாதலால் ஒற்றை வழி ஒளியியழைகளே தகவல் தொலைத்தொடர்பில் பயன்படுத்தப்படுகின்றன. பல்வழி ஒளியியழைகளில், ஒளிச்சமிஞ்சையானது பெரிதும் விரிவடைவதால், தொலை தூர தகவல் தொடர்பு சாலிட்டான்கள் பயணிப்பது சாத்தியமில்லை.

3. நேருறா விளைவுகள்

ஒளியியழைகளில் செலுத்தப்படும் ஒளிச்சமிஞ்சையின் செறிவானது குறைவாக இருக்கும் பட்சத்தில், நேருறு விளைவுகளைச் சார்ந்தே அதன் பண்புகள் இருக்கும். ஆனால், ஒளிச்சமிஞ்சையின் செறிவானது அதிகமாக இருக்கும்போது, அதன் பண்புகள் நேருறா விளைவுகளைச் சார்ந்து இருக்கும். இதனை, கீழ்காணும் சமன்பாடு மூலம் அறியலாம்:

$$P = \epsilon_0 [\chi^{(1)}E + \chi^{(2)}E.E + \chi^{(3)}E.E.E + \dots]$$

இங்கு,

P - தூண்டப்பட்ட முனைவாக்கம்

E - மின்புலம்

ϵ_0 - வெற்றிட உட்பகுதிறன்

இச்சமன்பாட்டில் $\chi^{(j)}$ ($j=1,2,3\dots$) என்பது $j^{\text{வது}}$ படி ஏற்புத்திறன் ஆகும். நேருறு விளைவுகள் $\chi^{(1)}$ ஏற்புத்திறன் மூலம் ஏற்படும். $\chi^{(2)}$ என்பது இரண்டாம் படி ஏற்புத்திறன் ஆகும். சிலிக்கான் டை ஆக்சைடு (SiO_2) போன்ற சமச்சீர் மைய மூலக்கூறுகளில், அனைத்து இரட்டைப்படை ஏற்புத்திறன்களும் அழிந்து, மிகச்சிறிய நேருறா விளைவு $\chi^{(3)}$ ஏற்புத்திறனால் ஏற்படக்கூடியதாகும்.

3.1 ஒளியியல் கொர் நேருறா விளைவு

ஒளியியழை ஒன்றில் செறிவூட்டப்பட்ட சமிஞ்சையானது நேருறா விளைவுகளை ஏற்படுத்தும். இதனை கீழ்காணும் சமன்பாட்டின் மூலம் எழுதலாம்:

$$n(\omega; |E|^2) = n_0(\omega) + n_2 |E|^2$$

$n_0(\omega)$ என்பது நேருறு ஒளிவிலகல் எண் மற்றும் n_2 என்பது ஒளியியல் கொர் நேருறா அளவி ஆகும். ஒளியியல் கொர் நேருறா விளைவானது ஒளிவிலகல் எண்ணினை ஒளிச்செறிவு சார்ந்த செயல்பாடாக ஆக்குகின்றது. இந்த விளைவானது தன் கட்ட பண்பேற்றத்தினை ஏற்படுத்துகிறது. தன் கட்ட பண்பேற்றம் என்பது, ஒளிச்சமிஞ்சையில் கட்ட பண்பேற்றமானது அந்த ஒளிச்சமிஞ்சையின் செரிவினாலேயே

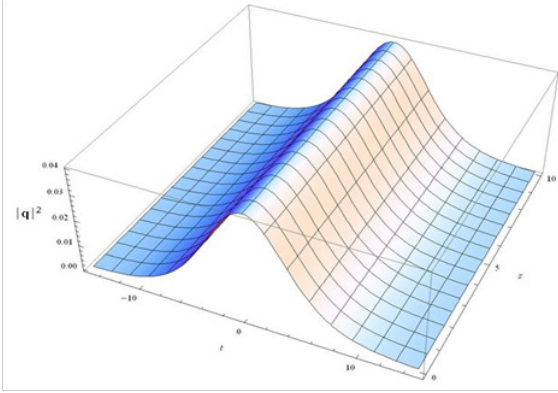
ஏற்படுவதுவதாகும். இது, நேருறு விளைவான குழுமத்திசைவேகப்பிரிகைக்கு நேர் எதிர் விளைவினை ஏற்படுத்துவதால் ஒளியிழையில் செலுத்தப்படும் சமிஞ்சையானது எவ்வித மாற்றமும் அடையாமல் சாலிட்டான்களாக பயணிக்கின்றன.

4. இயக்கச்சமன்பாடு

நேருறு விளைவான குழுமத்திசை வேகப்பிரிகை மற்றும் நேருறா விளைவான தன் கட்ட பண்பேற்றம் ஆகியவற்றை விவரிக்கும் சமன்பாடான நேருறா ஸ்ரொடிஞ்சர் சமன்பாடு

$$iq_z + 1/2 q_{tt} + |q|^2 q = 0$$

ஆகும். இதில் $q(x, t)$ என்பது மெதுவாக மாறி பயணிக்கும் துடிப்பு சமிஞ்சையின் வீச்சு ஆகும். இச்சமன்பாட்டின் இரண்டாம் பகுதியான q_{tt} குழுமத்திசைவேகப்பிரிகையையும் கடைசி பகுதியான $|q|^2 q$ தன் கட்ட பண்பேற்றத்தினையும் குறிப்பிடுவன.



படம் ; முப்பரிமாணத்தில் சாலிட்டான் பயணிப்பதை விளக்கும் வரைபடம்

5. சாலிட்டான் தீர்வு

நேருறா ஸ்ரொடிஞ்சர் சமன்பாட்டினை தீர்க்கக்கூடிய பிரத்யேக வழிமுறைகளைக் கொண்டு அச்சமன்பாட்டுத் தீர்வானது கீழ்க்கண்டவாறு கண்டறியப்பட்டுள்ளது;

$$q = 2i\beta \exp(2i\beta^2 z) \cdot \text{sech}(2\beta t)$$

இதில் β என்பது ஒளி ஊடகத்தினைச்சார்ந்த ஒரு மாறிலி ஆகும். இத் தீர்வானது மேலே உள்ள படத்தில் காட்டப்பட்டுள்ளது.

6. முடிவுரை

நேருறா ஒளியிழைகளில் சாலிட்டான்கள் பயணத்தின் முக்கியத்துவம், இயக்கச்சமன்பாடு மற்றும் தீர்வு ஆகியவை இக்கட்டுரையில் விவரிக்கப்பட்டுள்ளது. இதன் மூலம், தகவல் தொடர்பு தொழில்நுட்ப வளர்ச்சியில் சாலிட்டான்கள் என்பது ஒரு மைல்கல் என்றால் மிகையாகாது.

மேற்கோள்கள்

1. Hirota R. (1980), 'Solitons', (Ed.) Bullough R. K. and Caudrey P.J., Springer, Berlin.
2. Keiser G. (1991), 'Optical Fiber Communications', McGraw-Hill, New York.
3. Porsezian K., Shanmugha Sundaram P. and Mahalingam A. (1994), Phys. Rev. E., Vol. 50, pp. 1543 - 1547.
4. Agrawal G.P. (1995), 'Nonlinear fiber optics', Academic, San Diego.
5. Hasegawa A. and Kodama Y. (1995), 'Solitons in optical communications', Oxford, Clarendon.
6. Nakkeeran K., Porsezian K., Shanmugha Sundaram P. and Mahalingam A. (1998), Phys. Rev. Lett., Vol. 80, pp. 1425-1428.
7. Porsezian K., Shanmugha Sundaram P. and Mahalingam A. (1999), J. Phys. A, Vol. 32, pp. 8731 - 8737.

Ce கலப்பிடப்பட்ட ZnO நானோ தகடுகளின் ஒளி வினையூக்கம் மற்றும் பாக்கீரியா எதிர்ப்பு செயல்பாடுகள்

ஜி. பூங்கொடி, ஆர். ராஜேஸ்வரி

காயுதே மில்லத் மகளிர் அரசினர் கலைக்கல்லூரி, சென்னை-2.

ஆய்வுச்சுருக்கம்

தற்போதைய ஆராய்ச்சியில் சீரியம் (Ce) கலப்பிடப்பட்ட ZnO நானோதகடுகளில் காணக்கூடிய கட்டிலன் ஒளி வினையூக்க சிதைவை மையமாகக் கொண்டுள்ளது. Ce கலப்பிடப்பட்ட ZnO (Ce-ZnO) நானோதகடுகள் குறைந்த வெப்பநிலையில் எளிய சக-வீழ்ப்புதல் முறையால் தொகுக்கப்பட்டுள்ளன. Ce-ZnO நானோதகடுகளின் கட்டமைப்பு, ஊடுருவலியல் மற்றும் ஒளியியல் பண்புகள் எக்ஸ்-கதிர் விளிம்புவிளைவுமானி (XRD), எலக்ட்ரான் நுண்ணோக்கி படமாக்கல் (SEM), எக்ஸ் கதிர்களை பயன்படுத்திய ஆற்றல் சிதறடிப்பு ஆய்வு (EDAX) மற்றும் புறஊதா - கட்டிலன் நிறமாலைமானி ஆகியவற்றைப் பயன்படுத்தி பகுப்பாய்வுகள் செய்யப்பட்டது. தூய ZnO உடன் ஒப்பிடுகையில், அமராந்த் சாயத்தை கட்டிலன் ஒளியில் சிதைப்பதற்கான மேம்பட்ட ஒளி வினையூக்க செயல்பாட்டை Ce-ZnO நானோதகடுகள் வெளிப்படுத்துவது கண்டறியப்பட்டது. தற்போதைய ஆராய்ச்சி, Ce-ZnO நானோதகடுகள் ஒரு பொருத்தமான ஒளி வினையூக்க உலையில் ஜவுளி தொழிற்சாலை கழிவுகளில் உள்ள சாயங்களை அகற்றுவதற்கான ஒரு சிறந்த ஒளி வினையூக்கியாக பயன்படுத்தப்படலாம் என்பதை வெளிப்படுத்துகிறது. மேலும், Ce-ZnO நானோதகடுகள் எஸ்கெரிச்சியா கோலி (ஈ.கோலை) மற்றும் ஸ்டேஃபிலோகோகஸ் ஆரியஸ் (எஸ்.ஆரியஸ்) பாக்கீரியாக்களுக்கு எதிராக நல்ல பாக்கீரியா எதிர்ப்பு செயல்திறனைக் காட்டின.

முக்கிய சொற்கள்: Ce கலப்பிடப்பட்ட ZnO நானோதகடுகள், SEM, ஒளி வினையூக்க செயல்பாடு, பாக்கீரியா எதிர்ப்பு செயல்பாடு.

1. அறிமுகம்

சாயங்களால் மாசுபடுத்தப்பட்ட நீர் அதிகரித்து சுற்றுச்சூழலை மாசுபடுத்துகிறது. முக்கியமாக இந்தியா போன்ற நாடுகளில் ஜவுளித் தொழில்கள் தான் பொருளாதார வளர்ச்சியில் முக்கிய பங்கு வகிக்கின்றன. தொழிற்சாலைகளில் தற்போது பின்பற்றப்படும் கழிவு நீர் சுத்திகரிப்பு முறைகள், சூரிய

ஆவியாதல் அல்லது உயிரியல் சுத்திகரிப்பு முறைகள் ஆகும், அவை நச்சு சாயங்களை அகற்றுவதில் பயனுள்ளதாக இல்லை. குறைகடத்தி ஒளி வினையூக்க தொழில்நுட்பம் என்பது நீர் கிருமி நீக்கம், அபாயகரமான கழிவு நீக்கம் மற்றும் நீர் சுத்திகரிப்பு ஆகியவற்றில் பரவலான பயன்பாடுகளைக் கொண்ட ஒரு வேகமாக வளர்ந்து வரும் ஆராய்ச்சித் துறையாகும். துத்தநாக ஆக்ஸைடு (ZnO) இந்த

துறையில் அதிக வேதியியல் நிலைத்தன்மை, அதிக வினையூக்க செயல்பாடு, குறைந்த செலவு மற்றும் நச்சுத்தன்மையில்லாது போன்ற தனித்துவமான பண்புகள் காரணமாக இந்த துறையில் மிகவும் நம்பிக்கைக்குரிய குறைக்கடத்திகளில் ஒன்றாக அமைகிறது. இருப்பினும், ZnO இல் உள்ள ஒளியினால் தூண்டப்பட்ட மின்னூட்ட கேரியர்களின் விரைவான மறுசேர்க்கை வீதம் அதன் ஒளி வினையூக்க செயல்பாட்டைக் குறைக்கிறது.

எனவே இது வணிக பயன்பாட்டிற்கு சாதகமற்றது [1]. ZnO இல் மின்னூட்ட கேரியர்களின் மறுசேர்க்கையை குறைப்பதற்கான ஒரு முக்கியமான முறை கலப்பிடல் ஆகும். கலப்பிடலானது அதிக குறைபாடுகளையும் காலியிடங்களையும் உருவாக்கி அங்கு மின்னூட்ட கேரியர்களை பிடித்து வைத்து ZnO இன் ஒளி வினையூக்க செயல்பாட்டை மேம்படுத்துகிறது [2-5]. சமீபத்திய ஆய்வுகளில் ZnO அணிகோவைகளில் அருமண் அயனி கலப்பிடும் போது ZnO இல் பல்வேறு பண்புகளை மாற்றியமைக்கும் எனவும், கட்புலன் ஒளியில் அதன் ஒளி வினையூக்க செயல்பாடுகள் மேம்படுத்தப்படுவதும் தெரியவருகிறது [6-8]. அவற்றில், Ce ஆனது ZnOக்கான ஒரு முக்கியமான கலப்பிடப் பொருளாகக் கருதப்படுகிறது. ஏனெனில் இது ZnO இல் கடத்தும் விளிம்பிற்குக் கீழே ஒரு தூய்மையற்ற நிலையை உருவாக்குகிறது. இது வேலன்ஸ் எலக்ட்ரான்களின் பண்புகளில் மாற்றம் செய்கிறது [9]. தற்போதைய ஆய்வில், ஜவுளி சாயமான அமராந்தை Ce கலப்பிடப்பட்ட ZnO நானோதகடுகளால் (Ce-ZnO) புலப்படும் ஒளியில் ஒளி வினையூக்க சிதைவு மேற்கொள்ளப்பட்டது. Ce-ZnO நானோதகடுகள் தயாரிக்கப்பட்டு, பண்பாக்கப்பட்டு, கழிவுநீரில் இருக்கும் அமராந்த் சாயத்தின் சிதைவுக்கு பயன்படுத்தப்படுகின்றன.

2. பரிசோதனை விவரங்கள்

2.1 Ce-ZnO நானோ தகடுகளை தயாரித்தல்

தூய்மையான மற்றும் Ce-ZnO நானோ தகடுகள் எளிய சக-வீழ்ப்படித்தல் முறையைப் பயன்படுத்தி தொகுக்கப்பட்டன. ஆரம்பத்தில்,

0.25M துத்தநாக நைட்ரேட் ஹெக்ஸாஹைட்ரேட் ($Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$) மற்றும் 1mol% சீரியம் நைட்ரேட் ஹெக்ஸாஹைட்ரேட் ($Ce(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$) ஆகியவை காந்தக்களக்கியில் காய்ச்சி வடிகட்டிய நீரில் கரைக்கப்பட்டன. பின்னர் உகந்த யீழ் மதிப்பைப் பெற 0.1M NaOH கரைசல் அதில் விடப்பட்டது. இறுதியாக தேவையற்ற அயனிகளை அகற்றுவதற்காக பல முறை மையப்படுத்தப்பட்டு மற்றும் வடிகட்டிய நீரில் கழுவப்பட்டது. தூய்மையான ZnO ஐ பெற சீரியம் நைட்ரேட் ஹெக்ஸாஹைட்ரேட் இல்லாமல் அதே செயல்முறை மீண்டும் செய்யப்பட்டது. ஈரமான மாதிரிகள் 24 மணிநேரத்திற்கு $80^\circ C$ இல் உலர்த்தப்பட்டன. உலர்ந்த தூள் 3 மணிநேரத்திற்கு $400^\circ C$ -ல் பதனிடப்படுகிறது.

2.2 Ce-ZnO நானோ தகடுகளின் பண்பாக்கம்

Ce-ZnO மாதிரிகளின் படிக அமைப்பு XRD ஆல் வகைப்படுத்தப்பட்டது. ஆற்றல் பரவக் கூடிய எக்ஸ்ரே (ஈடிஎஸ்) பொருத்தப்பட்ட எலக்ட்ரான் நுண்ணோக்கி படமாக்கல் (SEM) ஐப் பயன்படுத்தி மாதிரிகளின் மேற்பரப்பு உருவவியல் மற்றும் தனிமங்களை உறுதிப்படுத்தல் ஆய்வு செய்யப்பட்டது. 300–800nm அலைநீள வரம்பில் LAB INDIA T90+ புறஊதா-கட்புலன் நிறமாலைமானியை பயன்படுத்தி ஒளிஊடு கடத்தும் நிறமாலைகள் எடுக்கப்பட்டது.

2.3. அமராந்த் சாயத்தின் ஒளி வினையூக்க சிதைவு

100W ஹாலோஜன் - டங்ஸ்டன் விளக்கை பயன்படுத்தி கட்புலன் ஒளி மூலமாகப் நீர் கரைசலில் உள்ள அமராந்த் சாயத்தின் சிதைவை தூய மற்றும் Ce-ZnO மாதிரிகளின் ஒளி வினையூக்க செயல்பாடு மதிப்பீடு செய்யப்பட்டது. பொதுவாக, 500ml அமராந்த் சாயக் கரைசலில் (20 மி.கி /L) ஒளி வினையூக்கி 0.2 கிராம்/L சிதறடிக்கப்பட்டது. ஒளி வினையூக்கம் செயல்பாட்டிற்கு முன், கரைசலானது இருட்டில் காந்த கலக்கியில் 30 நிமிடங்களுக்கு கலக்கப்பட்டது. ஒவ்வொரு 20 நிமிடங்களுக்கும் 522nm இல் அமராந்த் சாயக் கரைசலின் உறிஞ்சுதலை அளவிடுவதன் மூலம் ஒளி வினையூக்க சிதைவு மதிப்பிடப்பட்டது.

இதற்கு புறஊதா – கட்புலன் நிறமாலைமானி பயன்படுத்தப்படுகிறது. அமரந்த் சாயத்தின் சீரழிவு செயல்திறன் கீழ்க்கண்ட சமன்பாட்டைப் பயன்படுத்தி கணக்கிடப்பட்டது,

வினையூக்கசிதைவு செயல்திறன்(%) = $(C_0 - C_t)/C_0 \times 100 = (A_0 - A_t)/A_0 \times 100$ C_0 என்பது ஆரம்ப செறிவு, C_t என்பது 't' நிமிடத்திற்குப் பிறகு செறிவு ஆகும். கரைசலின் எதிர்வினை அமரந்த் சாயத்தின் பண்பு உறிஞ்சுஅலைநீளம் 522nmல் A_0 என்பது ஆரம்ப உறிஞ்சுதல் மற்றும் A_t என்பது 't' நிமிடத்திற்குப் பிறகு உறிஞ்சுதல் ஆகும்.

2.4 பாக்டீரியா எதிர்ப்புச் செயல்பாட்டு ஆய்வுகள்

கிராம் எதிர்மறை பாக்டீரியம் எஸ்கெரிச்சியா கோலி (ஈ.கோலி) மற்றும் கிராம் பாசிட்டிவ் பாக்டீரியம் ஸ்டேஃபிலோகோகஸ் ஆரியஸ் (எஸ். ஆரியஸ்) ஆகியவற்றிற்கு எதிராக தூய்மையான ZnO மற்றும் Ce-ZnO பாக்டீரியா எதிர்ப்பு செயல்பாடு திரவ வளர்ச்சி சோதனையைப் பயன்படுத்தி ஆய்வு செய்யப்பட்டது [10]. உகந்த அளவுமாதிரிகள் பாக்டீரியா வளர்ச்சி ஊடகத்தில் கலக்கப்பட்டு, இந்த ஊடகத்தின் 600nm (பாக்டீரியா மற்றும் மாதிரி) ஒளியியல் அடர்த்தி டிஜிட்டல் ஒளிநிறமாலைமானியைப் பயன்படுத்தி 24 மணிநேரத்திற்குப் பிறகு அளவிடப்படுகிறது. உறிஞ்சுதலின் குறைவு பாக்டீரியா வளர்ச்சிக்கு எதிரான மாதிரியின் விளைவாக கருதப்பட்டது. கீழ்க்கண்ட சமன்பாட்டைப் பயன்படுத்தி பாக்டீரியா தடுப்பு கணக்கிடப்பட்டது.

$$\% \text{ of bacterial inhibition} = \frac{\text{Absorbance of control} - \text{Absorbance of sample}}{\text{Absorbance of control}}$$

3. முடிவு மற்றும் விவாதங்கள்

3.1 கட்டமைப்பு மற்றும் உருவவியல் ஆய்வுகள்

தயாரிக்கப்பட்ட Ce-ZnO மாதிரிகளின் படிக அமைப்பு XRD பகுப்பாய்வு மூலம் உறுதிப்படுத்தப்பட்டுள்ளது. படம் 1 Ce-ZnO இன் தூள் XRD வடிவங்களைக் காட்டுகிறது. மாதிரிகளின் அனைத்து விளிம்பு விளைவு உச்சிகளும் குறியிடப்பட்டு, அது லூர்ட்சைட் அறுகோண அமைப்பு (JCPDS No.36-1451) என கண்டறியப்பட்டது. சீரியம் அல்லது வேறு எந்த சேர்மங்களுடைய கூடுதல்

உச்சிகள் கண்டறியப்படவில்லை என்பது XRD தரவிலிருந்து தெளிவாகிறது. இது பெறப்பட்ட மாதிரி ஒற்றை கட்டமானது என்பதை உறுதிப்படுத்துகிறது.

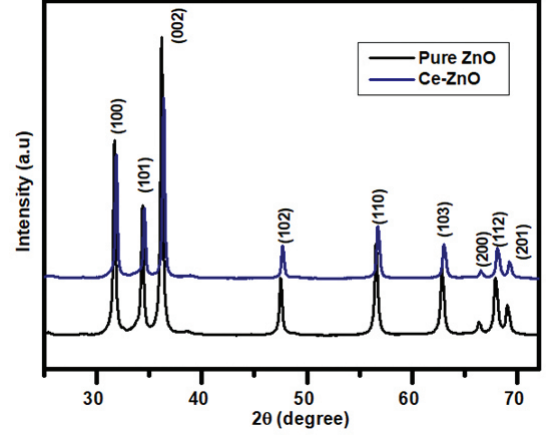


Figure 1. XRD pattern for Ce-ZnO nanosheets

படம் 2 (a) தொகுக்கப்பட்ட Ce-ZnO மாதிரிகளின் SEM படத்தைக் காட்டுகிறது. தயாரிக்கப்பட்ட மாதிரிகள் நானோதகடுகளின் தொகுப்பு மற்றும் அதிக அளவில் வளர்க்கப்பட்டதை காணலாம்.

நானோதகடுகள் மிக அதிக அடர்த்தி யிலும் கிட்டத்தட்ட சீரான அளவிலும் வளர்க்கப்பட்டுள்ளது என்பதை SEM படங்கள் வெளிப்படுத்துகின்றன. ZnO இல் சீரியம் இருப்பதை உறுதிப்படுத்த EDAX பகுப்பாய்வு செய்யப்பட்டது. படம் 2 (b) Ce-ZnO மாதிரியின் EDAX நிறமாலையைக் காட்டுகிறது.

மாதிரிகள் Zn, Ce மற்றும் O ஆகிய வற்றைக் கொண்டிருப்பதை முடிவுகள் வெளிப்படுத்துகின்றது, இது ZnO இல் Ce இன் கலப்பிடலை உறுதிப்படுத்துகிறது.

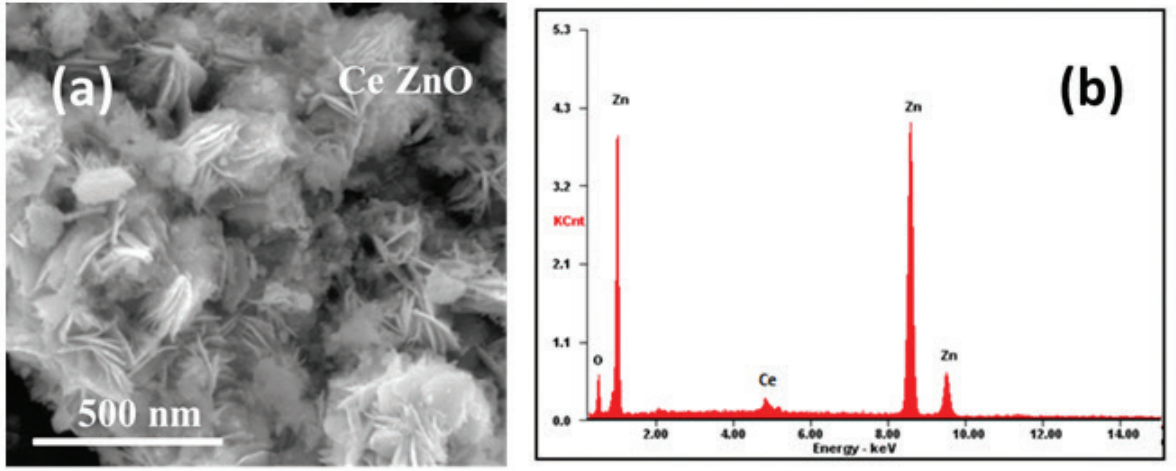


Figure 2. (a)SEM image of Ce-ZnO and (b) EDAX spectrum of Ce- ZnO

3.2 ஒளிஆய்வுகள்

300 – 800 nm அலைநீள வரம்பில் தூய்மையான ZnO மற்றும் Ce-ZnO மாதிரிகளின் புறஊதா – கட்டிலன் ஒளிநிறமாலை படம் 3 இல் காட்டப்பட்டுள்ளது. ஒளி கட்டஇடைவெளி ஆற்றல் மதிப்புகள் (E_g) நேரியல் பகுதியின் விரிவாக்கத்தின் மூலம் கணக்கிடப்பட்டன. இது ($\alpha h\nu$) மற்றும் $h\nu$ இக்கான படம் 3 இன்

நடுவில் காட்டப்பட்டுள்ளது. தூய ZnO மற்றும் Ce-ZnO மாதிரிகளின் கட்ட இடைவெளி மதிப்புகள் முறையே 3.22eV, மற்றும் 3.05eV எனக் கணக்கிடப்பட்டது. கட்ட இடைவெளி மதிப்பு குறைவது ZnO வேலன்ஸ் பட்டை மற்றும் 4f மட்டத்தில் தோன்றிய அருமன் அயனி ஆகியவற்றுக்கு இடையேயான கட்டண பரிமாற்றத்தின் காரணமாகும் [11].

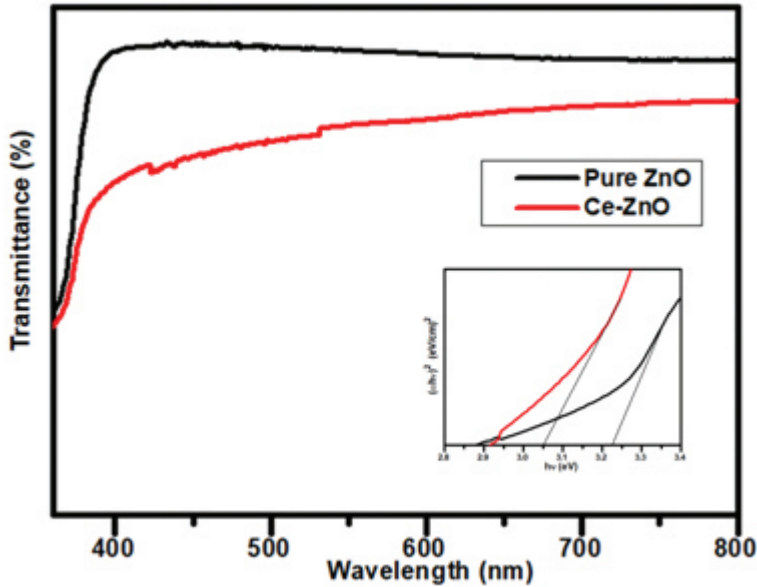


Figure3 . Optical transmission spectra of Ce-ZnO (Inset: Tauc plot between E_g and $(\alpha h\nu)^2$)

3.3 ஒளிவினையூக்கசெயல்பாடுகள்

அமராந்த் சாயச் சிதைவை கட்டிலன் ஒளி கதிர்வீச்சை பயன்படுத்தி தூய ZnO மற்றும் Ce-ZnO மாதிரிகளின் ஒளி வினையூக்க

செயல்பாடு ஆராயப்பட்டது. Ce-ZnO மாதிரிகள் தூய ZnO விட மேம்பட்ட ஒளி வினையூக்க செயல்பாட்டை வெளிப்படுத்துகின்றன என்பது கண்டறியப்பட்டது. படம் (Fig.4 (a - c))

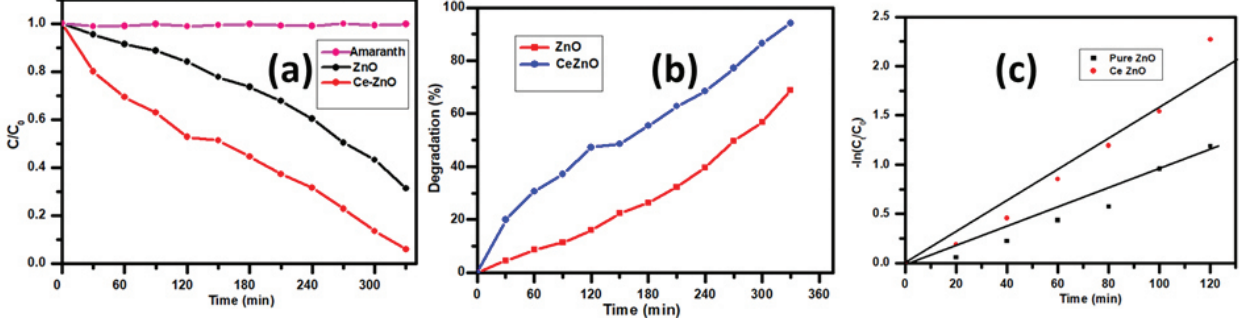


Fig.4 Photocatalytic (a) degradation (b) degradation efficiency and (c) degradation kinetics of Amaranth dye for pure and Ce-ZnO samples

படம் 4 (c) அமராந்த் சாயத்தின் ஒளி வினையூக்க சிதைவுக்கான முதல் வரிசை எதிர்வினை இயக்க மாதிரியைக் காட்டுகிறது. அமராந்த் சாயத்திற்கான இயக்க வரைவிலிருந்து கணக்கிடப்பட்ட வெளிப்படையான முதல் வரிசை

எதிர்வினை வீத மாறிலி (k), அரை ஆயுள் மதிப்பு (t_{1/2}) மற்றும் நேரியல் குணகம் (R²) அட்டவணை 1 இல் கொடுக்கப்பட்டுள்ளது. அட்டவணையில் இருந்து, Ce-ZnO மாதிரி தூய ZnO ஐ விட அதிக ஒளி வினையூக்கம் செயல்பாட்டைக்காட்டியது.

Sample	Rate constant k(min ⁻¹)	Half Life Value t _{1/2} (min)	Linear coefficient R ²
Pure ZnO	0.0099	69.94	0.960
Ce-ZnO	0.0188	37.59	0.981

Table 1 Kinetic parameters of pure and Ce-ZnO samples for Amaranth dye

ZnO அணிக்கோவையில் Ce கலப்பிடலினால் உருவாக்கப்படும் குறைபாடு மற்றும் காலியிடங்கள் ஒளிதூண்டப்பட்ட எலக்ட்ரான்களைப் பிடிக்கும் மையங்களாக மாறக்கூடும், இதனால் ஒளிதூண்டப்பட்ட எலக்ட்ரான்கள் மற்றும் துளைகளை மீள் இணைப்பது திறம்பட தடுக்கப்படும். சிக்கிய எலக்ட்ரான் அல்லது துளை வினையூக்கின் மேற்பரப்புகளுக்கு இடம்பெயர்ந்து, அங்கு அது சாய மூலக்கூறுகளுடன் ஒரு ரெடாக்ஸ் எதிர்வினையில் பங்கேற்கும், இதனால் எலக்ட்ரான் மற்றும் துளை மறுசீரமைப்பைக் குறைக்கும், எனவே ஒளி வினையூக்க செயல்திறன் அதிகரிக்கிறது [12-14]. மேலும் Ce-ZnO இன் பட்டைஇடைவெளி ஆற்றலின்

குறைப்பும் மேம்பட்ட ஒளி வினையூக்க செயல்பாட்டிற்கு காரணமாக இருக்கலாம்.

3.4 பாக்டீரியா எதிர்ப்பு செயல்பாடு

தூய ZnO மற்றும் Ce-ZnO இன் பாக்டீரியா தடுப்பு படம் 5 இல் காட்டப்பட்டது. Ce கலப்பிடல் ZnO இன் பாக்டீரியா எதிர்ப்பு செயல்பாட்டை மேம்படுத்துகிறது என்று முடிவுகள் காட்டுகின்றன. ZnO அணிக்கோவையில் Ce கலப்பிடலினால் அதிக ஆக்ஸிஜன் காலியிடங்களையும் குறைபாடுகளையும் உருவாக்கக்கூடும், இது எதிர்வினை ஆக்ஸிஜன் இனங்கள் (ROS) உருவாகுவதை அதிகரிக்கிறது இதனால் மாதிரியின் பாக்டீரியா எதிர்ப்பு செயல்பாட்டை மேம்படுத்துகிறது.

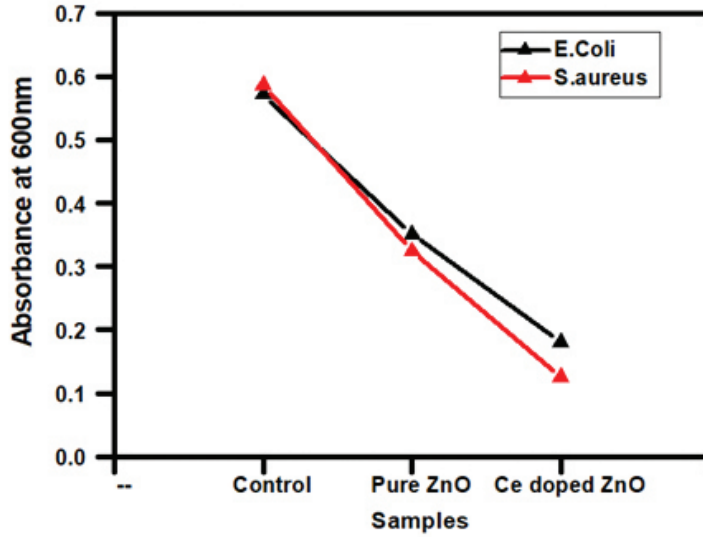


Figure 5. Antibacterial activity of Pure and Ce-ZnO samples

5. முடிவுரை

தூய ZnO மற்றும் Ce-ZnO நானோதகடுகள் எளிய சக-வீழ்ப்படித்தல் முறையால் தொகுக்கப்பட்டன. XRD பகுப்பாய்வு, அனைத்து தயாரிக்கப்பட்ட மாதிரிகளும் அறுகோண வூர்ட்சைட் கட்டமைப்பை வெளிப்படுத்துகின்றன என்பது காட்டுகிறது. மாதிரிகள் நானோதகடுகள் கட்டமைப்பைக் கொண்டிருப்பதை SEM படங்கள் வெளிப்படுத்தின. ஒளியியல் ஆய்வுகள் பட்டை

இடைவெளியைக் குறைப்பதைக் காட்டின. ZnO இல் Ce கலப்பிடல் எலக்ட்ரான் பொறி மையங்களாக செயல்படுகிறது. மேலும் இது எலக்ட்ரான் துளை மறுசீரமைப்பைத் தடுக்கிறது.

இது ROS உருவாகுவதற்கு வழிவகுக்கிறது. இதனால் ZnO இன் ஒளி வினையூக்கம் மற்றும் பாக்டீரியா எதிர்ப்பு செயல்பாட்டை மேம்படுத்தப்படுகிறது.

References

1. I. Udo, M.K. Ram, E.K. Stefanakos, A.F. Hepp, D. YogiGoswami, *Mater. Sci. Semicond. Process* 16 (2013) 2070-2083.
2. W. Xie, Y. Li, W. Sun, J. Huang, H. Xie, X. Zhao, J. *Photochem. Photobiol. A216* (2010) 149-155.
3. P. Jongnavakit, P. Amornpitoksuk, S. Suwanboon, N. Ndiege, *Appl. Surf. Sci.* 258 (2012) 8192-8198.
4. J. Zhao, L. Wang, X.Q. Yan, Y. Yang, Y. Lei, J. Zhou, Y.H. Huang, Y.S. Gu, Y. Zhang, *Mater. Res. Bull.* 46 (2011) 1207-1210
5. Manjula G. Nair, M. Nirmala, K. Rekha, A. *Mater. Lett.* 65 (2011) 1797-1800.
6. P. Madahi, N. Shahtahmasebi, A. Kompany, M. Mashreghi, M. M. Bagheri-Mohagheghi, A., *Phys. Scr.*, 84 (2011) 035801-5.
7. S. Suwanboon, P. Amornpitoksuk, P. Bangrak, N. Muensit, *Mater. Sci. Semicond. Process* 16 (2013) 504-512.
8. K. Rekha, M. Nirmala, Manjula G. Nair, A. Anukaliani, *Physica B* 405 (2010) 3180-3185.
9. V. Štengl, S. Bakardjieva, N. Murafa, *Mater.Chem.Phys.*114 (2009) 217-226.
10. Vasanthi M., Ravichandran K., Jabena Begum N., Muruganantham G., Snega S., Panneerselvam A. and Kavitha P *Superlattices Microstruct.*, 2013, 55, 180 - 190.
11. R. Kumar, A. Umar, G. Kumar, M.S. Akhtar, Y. Wang, and S.H. Kim, *Ceram. Int.* 41, 7773 (2015).
12. L. Gomathi Devi, N. Kottam, B. Narasimha Murthy, S. Girish Kumar, *J. Mol. Catal. A: Chem.* 328 (2010) 44-52.
13. R. Ullah, J. Dutta, *Journal of Hazardous Materials* 156 (2008) 194-200.
14. S.M. Lam, J.C. Sin, A.Z. Abdullah, A.R. Mohamed, *Mater.Lett.*93 (2013)423-426.

அறிவியல் கலைச்சொற்கள்

பொ. ஜெகதீஸ்வரன், வி. நடராசன்

ராஜலக்ஷ்மி தொழில்நுட்பக் கல்லூரி

amplification factor	பெருக்கக் காரணி
amplifier	பெருக்கி
amplifier noise	பெருக்கி இரைச்சல்
amplitude	வீச்சு
amplitude modulation	வீச்சு அலையேற்றம்
amplitude of forced vibration	திணிப்பதிர்வு வீச்சு
analogy	ஒப்புமை
analyser	பகுப்பி, பகுப்பாய்வுக்கருவி
analytical method	பகுப்புமுறை
anchor ring	நங்கூர வளையம்
andersons bridge	ஆன்டர்சன் வலை, ஆன்டர்சன் பாலம்
anemometer	காற்றுவேகமானி
aneroid barometer	அனிராய்டுபாரமானி
angle of aberration	பிறழ்ச்சிக் கோணம்
angle of contact	தொடு கோணம்
angle of declination	சாவுக் கோணம்
angle of depression	இறக்கக் கோணம்
angle of elevation	ஏற்றக் கோணம்
angle of emergence	விடு கோணம்
angle of friction	உராய்வுக் கோணம்
angle of inclination	சாய் கோணம்
angle of minimum deviation	மீச்சிறு ஒளிவிலகு கோணம்
angle of projection	எறி கோணம்
angle of reflection	எதிரொளிப்பு கோணம்,
angle of rotation	சுழற்சிக் கோணம்

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**