

பென்சோடிரியோசோல் சாலிசிக் அமிலத்தின் (BSA) தனிப் படிகம் வளர்த்தல் மற்றும் மூலக்கூறு மாதிரி மூலம் பண்பாய்வு செய்தல்

ப. சத்யா, என். கார்த்திகேயன்

இயற்பியல் துறை, அண்ணா பல்கலைக்கழகம், சென்னை - 600 025.
sathyam.chawla@gmail.com

தமிழாக்கம் : ஆர். ராஜேஸ்வரி காயிதேமில்லத் அரசு மகளிர் கல்லூரி,

ஆய்வுச் சுருக்கம்

பென்சோடிரியோசோல் சாலிசிக் அமிலம் (BSA) தனிப்படிகம் நீராவிபகுதல் கரைசல் வளர்ப்பு முறை மூலம் வளர்க்கப்பட்டது. வளர்ந்த படிகமானது தனி துகள் x-கதிர் விளைவு விளிம்பு மூலம் உறுதிபடுத்தப்பட்ட BSA சேர்மம் மோனோகிளினிக் அமைப்பில் வெளி தொகுதி $P2_1/n$ கொண்டு மத்திய - சமசீர் இயல்புடன் படிகமானது அதன் அளவீடு பண்புகளாகிய $a=13.80(7)\text{\AA}$, $b=5.41(1)\text{\AA}$, $c=16.66(2)\text{\AA}$, $\alpha=90^\circ$, $\beta=102.27(3)^\circ$, $\gamma=90^\circ$, $V=1216(4)\text{\AA}^3$ கிடைத்தன. BSA சேர்மத்தின் அதிர்வு நிறப்பிரிகை (FTIR) மற்றும் இராமன் பிரிகை கோட்பாடு ரீதியாகவும் பரிசோதனையிலும் ஆய்வு செய்யப்பட்டது. B3LYP/6-31g(d,p) அடர்த்தியான செயல்பாடுகளால் BSA உகந்த வடிவியல் அளவுருக்கள் கிடைத்தன. HOMO மற்றும் LUMO ஆற்றல் மதிப்புகள் அவற்றின் அளவீடுகளுடன் கணக்கிடப்பட்டு அவற்றுள் நடக்கும் ஆற்றல் பரிமாற்றம் அறியப்பட்டது. மூலக்கூறு மின்நிலையான ஆற்றல் (MEP) மேற்பரப்பு வரைபடம், அதிக விளைவு மற்றும் இருமுனை இயக்கம் ஆகியவை கணக்கிடப்பட்டன. $^1\text{H NMR}$ கற்றையின் மூலம் புரோட்டான்களின் எண்ணிக்கை அறியப்பட்டது. இந்த சேர்மம் 134°C வெப்ப நிலை வரை நிலையானதாகவும் 216°C முதல் சிதைவடையும் தொடங்குகிறது. மூலக்கூறுகளின் உயிரியல் நடவடிக்கைகள் பேசில்லஸ் செரிஸஸ் பாக்கிரியாவிற்கு ஒரு சிறந்த தடுப்பூசியாக அறியப்பட்டது. இந்த கண்டுபிடிப்புகள் சிறந்த கற்றையின் மூலம் உயிரியல் செயல்பாடுகளுடன் புதிய டிரைசோல் சேர்மம் அமைய வழிகாட்டுகின்றன.

1. அறிமுகம்

ஆன்டிமைக்ரோபியல் காரணிகள் தேவை மற்றும் புதிய வளர்ச்சி மருத்துவ கரிம வேதியியலில் முதன்மை இடத்தை வகிக்கிறது. (பாண்டே மற்றும் பலர் 1999). சமீப ஆண்டுகளில் பல்வேறு வகையான நோய்களுக்கு சிகிச்சை அளிப்பதற்காக மருத்துவ பயன்பாடுகளில் $^\circ\mu^{23/4}$ அசோ பல்வகை வளைய சேர்மங்கள்

பயன்படுத்தப்படுகின்றன (டியூவா மற்றும் பலர் 2011). மேலும் அவற்றின் வழிமுறைகள் வளைய சேர்மங்கள் தயாரிப்பிலும் பல புதிய ஆன்டி பாக்கிரியா பொருட்களை அறியவும் உதவுவதால் ஆராய்ச்சி சமூகத்திற்கு முக்கிய சவலாக உள்ளது. ஆன்டிமைக்ரோபியல், ஆன்டி கேன்சர் மற்றும் ஆன்டிவைரஸ் போன்ற உயிரியல் செயல்பாடுகளில் இவை முக்கியப்பங்கு

வகிக்கின்றன (கேல் மற்றும் பலர் 2010).

சாலிசிலிக் அமிலம் (SA) 2-ஹைட்ராக்கி பென்சோயிக் அமிலம் என்று அறியப்படுகிறது. இது உணவு தயாரிப்பு நுண்ணுயிர் எதிர்ப்பு பொருட்கள் மற்றும் கரிம தயாரிப்பில் பரவலாக பயன்படுகிறது. மேலும் புதிய காய்கறிகள் மற்றும் பூஞ்சை எதிர்க்கும் பொருட்களிலும் ஆன்டிமைக்ரோபியல் கழுவுப் பொருட்களில் பயன்படுகிறது. (காராக்கா மற்றும் பலர் 2015).

சாலிசிலிக் அமிலத்தின் வழிமுறைகள் அதன் இயற்வேதிபண்புகளால் ஆராயப்பட்டு, அதன் உயிரியல் மற்றும் மருத்துவ பண்புகளால் மிகவும் துல்லியமாக ஆய்வாளர்களால் கவனிக்கப்படுகிறது.

இதனால் தலைப்பில் உள்ள சேர்மமும் நைட்ரஜன் உள்ள ஹைட்ரஜன் பிணைப்புள்ள மூலக்கூறு கொண்டிருப்பதால், அதுவும் அதன் சிறந்த ஆன்டிமைக்ரோபியல், பண்புகளால் கவனிக்கப்படுகிறது.

BSA சேர்மம் மோனோகிளினிக் அமைப்பில் P2₁/R வெளிவகை கொண்டு படிமமாகிறது. மேலும் அதன் பிறிகை பண்புகளையும் மருத்துவ வினை வழிமுறைகளையும் அறிய விரிவான பரிசோதனை மற்றும் கோட்பாடு ஆய்வுகள் தேவைப்படுகின்றன. காஸீயன் 09 மென்பொருள் தொகுப்பைக் கொண்டு அதன் பிறிகை ஆய்வுகள் கணினி ஆய்வுகள் மூலமாகவும் பரிசோதனை மூலமாகவும் அறியப்பட்டது.

முதல் வரிசையில் மிக உயர்ந்த அளவிலான உயர்நிலைப் பண்பேற்றம் என்பது இரண்டாவது நிலை தணிக்கை ஆகும். BSAன் வேதி வினை திறன் மூலக்கூறு மின்சக்தி சார்ந்த மேற்பரப்பு மற்றும் பல்வேறு மின்னணு அளவுறுக்கள் ஆகியவற்றால் விவாதிக்கப் பட்டது. HOMO மற்றும் LUMO ஆற்றலை பற்றி ஆய்வு சாதாரண நிலையில் மூலக்கூறின் நடக்கும் ஆற்றல் பரிமாற்றத்தை அறிய உதவுகிறது. ஆற்றல் இடைவெளி மற்றும் வேதி கடினத் தன்மை மூலக்கூறில் மருந்து செயல்படும் இடத்தை நிலைப்படுத்த உதவுகிறது. சேர்மங்களுக்கு

இடையே உள்ள ஒருங்கிணைப்பு (நியூக்ளியோபிலிக் அல்லது எலக்ட்ரோபிலிக்) வகைகள் உருவாக்குவதற்கு மின்னணு பரிமாற்றம் மற்றும் எலக்ட்ரோபிலிசிட்டி அலைவு உடன் இணைந்து பயன்படுத்தப்படலாம்.

BSA சேர்மத்தின் உயிரியல் நடவடிக்கைகள் ஆராயப்பட்டு அவை பேசில்லஸ் சீரிஸ் பாக்டீரியா மற்றும் ஹைட்ராக்கில் சல்பைட் என்சைம் ஆகியவற்றை தடுக்க சிறந்து விளங்குகின்றன. இந்த கண்டுபிடிப்புகள் புதிய ட்ரைஅசோல் சேர்மங்களை சிறந்த உயிரியியல் செயல்பாடு களுடன் வடிவமைக்க வழிகாட்டுகிறது. இதன் படி இந்த ஆய்வு BSA படிமத்தின் வடிவு அதிர்வு மற்றும் ஒளியியல் பண்புகளை தருகிறது.

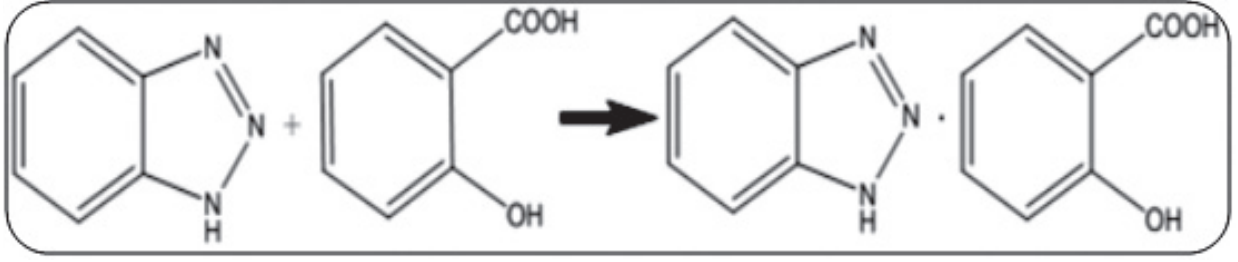
2. தயாரிப்பு மற்றும் படிம வளர்ச்சி

சரிவிகித பென்சோடிரை அசோல் மற்றும் சாலிசிலிக் அமிலத்தை நீர் மற்றும் எத்தனால் கரைசலில் அறை வெப்பநிலையில் கலப்பதன் மூலம் BSA சேர்மம் தயாரிக்கப்படுகிறது. இந்த கரைசல் இரண்டு நாட்கள் தொடர்ச்சியாக கலப்பதன் மூலம் ஒருமித்த கலவையாக கிடைக்கப் பெற்று வாட்மேன் வடிப்பான் காகிதத்தை கொண்டு (11µm) வடிகட்டப்படுகிறது. மெதுவான நீராவிவாக்கும் முறைமூலம் வடிகட்டப்பட்ட கரைசல் ஒரே வெப்பநிலையில் 30°C ல் வைக்கப்படுகிறது. இரண்டு முறை மறுமுறை பதங்கமாக்குதல் முறைமூலம் தயாரிக்கப்பட்ட உப்பின் தூய்மை மேம்படுத்தப்பட்டது.

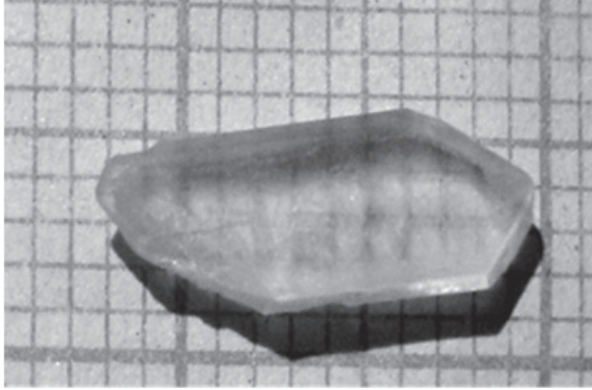
முதன்மை கரைசலில் இருந்து வளர்க்கப் பட்ட படிமம் 15 நாட்கள் கழித்து எடுக்கப்பட்டது. படங்கள் 1 மற்றும் 2 முறையே வளர்ந்த BSA படிமங்களின் படிம உருவாக்க வேதிவினை புகைப் படத்தையும் காட்டுகின்றன. இந்த படிமங்கள் ஹைக்ரோஸ்கோபிக் இல்லாத ஒளியியல் வெளிப்படான தன்மை கொண்டவை.

3. முடிவுகள் மற்றும் விவாதம்

BSA படிமத்தின் ஒற்றை படிம எக்ஸ்-விளிம்பு பகுப்பாய்வு கட்டமைப்பை உறுதிப்படுத்தவும் கூட்டமைப்பு அளவுநிலை மதிப்பிடவும்



படம் - 1 : பென்சோட்ரியோசோலின் உருவ வரைபடம்



படம் - 2 : பென்சோட்ரியோ சோல்சாலிசிலிக் அமிலத்தின் ஒற்றை படிகம்

செய்யப்பட்டது. மோனோகிளினிக் படிக அமைப்பில் இந்த சேர்மம் $P2_1/N$ வெளி தொகுதியுடன் மையம்-சமச்சீர் கொண்டு அறியப்பட்டது. கூட்டமைப்பின் அளவுருக்கள் $a=13.80(7)\text{\AA}$, $b=5.41(1)\text{\AA}$, $c=16.66(2)\text{\AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 102.27(3)^\circ$, $\gamma = 90^\circ$, $V=1216(4)\text{\AA}^3$. இது முந்தைய மதிப்புகளுடன் உடன்பட்டு இருந்தது (வாங் மற்றும் 2012).

இந்த படிக அமைப்பில் மூலக்கூறுகளுக்கிடையே உள்ள பலகீனமான N-H...N, O-H...N, N-H...O-ல் இடையே உள்ள தொடர்பு மூலம் நிலைப்படுத்தப்பட்டு ஒரு முப்பரிமான வலைப்பின்னலை ஏற்படுத்துகிறது.

3.1. அதிர்வு பகுப்பாய்வு

தலைப்பு சேர்மத்தின் சோதனை மற்றும் கணக்கிடப்பட்ட FT-IR மற்றும் FT-இராமன் கற்றை முறையே படம் 3 மற்றும் 4ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. IR மாலை 1605 செமீ⁻¹ மற்றும் FT

இராமன் மாலை 1589 செமீ⁻¹ ஆகியவற்றால் காணப்பட்ட எண் C-C நீட்டிப்பு அதிர்வெண்களை குறிக்கிறது. கோட்பாட்டளவில் கணக்கிடப்பட்ட FTIR மற்றும் இராமன் அளவுகளான 1634 செமீ⁻¹ மற்றும் 1550 செமீ⁻¹ சோதனை அளவுகளுடன் சிறப்பாக ஒத்துச் செல்கின்றன.

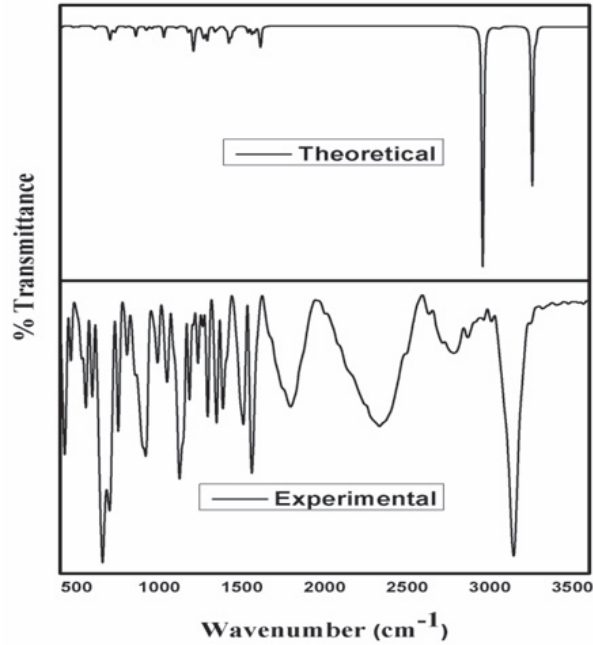
FTIR கற்றையில் கார்பனைல் (C=O) சீரான நீட்சி அதிர்வு 1659 செமீ⁻¹ல் கூர்மையான அளவுகள் மூலமும் கணக்கிடப்பட்ட B3LYP/6-31G(d,p) அளவுகள் 1709 செமீ⁻¹ மூலம் காட்டப்பட்டுள்ளது. கண்டறியப்பட்ட FT இராமன் கற்றை கணக்கிடப்பட்ட கற்றையுடன் ஒத்துள்ளதை அறியப்பட்டது. அமிலத் தொகுதியில் மின்னணு மற்றும் ஸ்டிரிக் விளைவுகளால் சேர்மத்தில் உள்ள நைட்ரோ தொகுதிகளால் C=O அதிர்வு பாதிக்கப்பட்டு, அதிர்வு கற்றைகள் குறைந்த மதிப்பிற்கு மாறுகின்றன. FTIR மாலையில் N-H சீரான நீட்சி அதிர்வு 3240 செமீ⁻¹ல் அறியப்பட்டது. இதே அதிர்வு FT இராமன் மாலையில் 3191 செமீ⁻¹ ல் அறியப்பட்டது. கோட்பாட்டில் உள்ள மாலை பகுப்பாய்வுகளுடன் இந்த அதிர்வு வளைவுகள் ஏறக்குறைய ஒத்து இருந்தன.

பொதுவாக O-H நீட்சி அதிர்வு 3400– 3600 செமீ⁻¹ ல் தோன்றும் மிக பெரிய கற்றையின் மூலம் பண்பறியப்படுகிறது. தலைப்பு சேர்மத்தின் சாலிசிலிக் அமிலத் தொகுதியில் உள்ள O-H நீட்சி அதிர்வு 2885 செமீ⁻¹ 3054 செமீ⁻¹ ஆக FT-IR மாலையிலும், பலகீனமான கற்றைகளாக இதே அதிர்வுகள் 3238 செமீ⁻¹ல் இராமன் மாலையில் தோன்றின. பலகீனமான ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு OH மற்றும் கார்பாக்சிலிக் தொகுதிகளுக்கு இடையே இருப்பதை இந்த பரந்த உச்சங்கள்

காட்டுகின்றன. OH தொகுதி யின் தளத்தில் உள்ள அதிர்வு வளைவுகள் 1400 செமீ^{-1} பங்கேற்கிறது. OH தொகுதியின் தளத்தில் உள்ள அதிர்வு வளைவுகள் 1481 செமீ^{-1} மற்றும் 1443 செமீ^{-1} ல் மற்றும் 1499 செமீ^{-1} ல் FT இராமனில் குறிக்கப்படுகின்றன. O-Hன் தளத்தில் இல்லாத வளைவுகள் FT-IR 848 மற்றும் 756 செமீ^{-1} லும் காணப்பட்டது. அனைத்து மதிப்புகளும் கோட்பாட்டில் உள்ள மதிப்புகளுடன் ஒத்துப் போகின்றன.

கார்பாக்சில் அமிலங்கள் ஹைட்ரஜன் பிணைப்புடன் கூட வலுவான போக்கு இருப்பதால் இவை திட, திரவ நிலைகளில் மற்றும் செறிவு கரைசலில் டைமர்களாகவும் காணப்படுகின்றன. C-N நீட்சி அதிர்வு எப்போதும் மற்ற கற்றைகளுடன் கலந்து இருப்பதால் பொதுவாக $1266 - 1382 \text{ செமீ}^{-1}$ பகுதியில் இருக்கிறது.

இதற்கேற்ப IR மாலையில் 1280 செமீ^{-1} மற்றும் FT இராமன் மாலையில் 1247 செமீ^{-1}

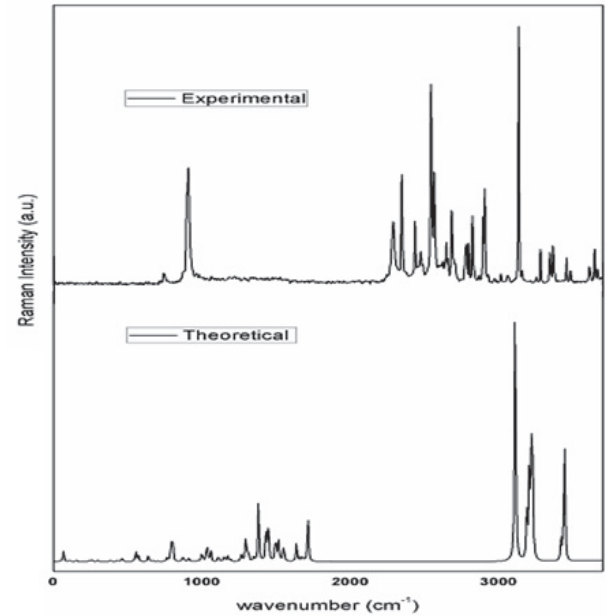


படம் - 3: பென்சோட்ரியோசோல் மற்றும் அகச்சிவப்பு நிறமாலை நோக்கப்பட்ட சாலிசிலிக் அமிலத்தின் கோட்பாட்டு

ஏற்பட்ட சிறிய உச்சம் C-N ல் நீட்சி அலைவரிசை என்பதனை கோட்பாட்டில் உள்ள மதிப்புகளுடன் ஒத்துள்ளது என்பதனை அறிய முடிகிறது.

C-H நீட்சி அதிர்வு $1443 - 1484 \text{ செமீ}^{-1}$ மற்றும் $1382 - 1651 \text{ செமீ}^{-1}$ ல் அகச்சிவப்பு மற்றும் இராமன் மாலையில் உருவாகிறது. எனவே, சோதனை மற்றும் கணக்கிடப்பட்ட அலை வரிசைகளுக்கிடையே நன்கு ஒத்து போகின்றன. C-H தளத்தில் இல்லாத அதிர்வுகள் வலுவான பிணைந்த அதிர்வுகளாகவும் அகச்சிவப்பு அலை வரிசையில் $902 - 654 \text{ செமீ}^{-1}$ லும் $1013 - 544 \text{ செமீ}^{-1}$ ல் FT இராமன் மாலையிலும் காணப்படுகின்றன.

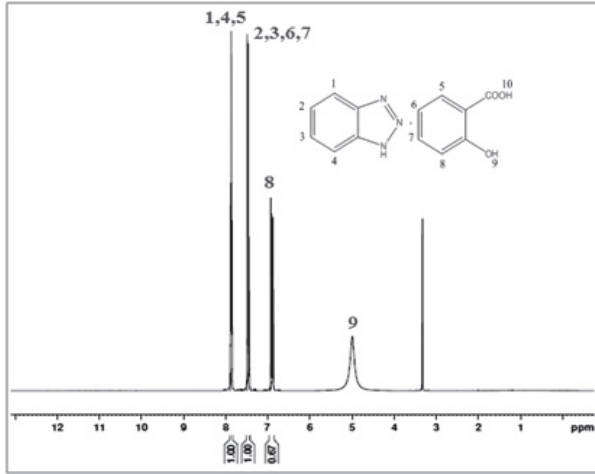
C-H தளத்தில் உள்ள அதிர்வு வளைவுகள் C-H நீட்சி அதிர்வுகளுடன் பிணைந்து $1300 - 1000 \text{ செமீ}^{-1}$ பகுதியில் காணப்படுகிறது. பென்சோ டிரைசோல் பங்கில் கரிம C-H வளைவு அதிர்வு IR ல் 1219 செமீ^{-1} லும், FT-இராமனில் 1235 செமீ^{-1} லும் காணப்படுகிறது.



படம்-4 : நோக்கப்பட்ட மற்றும் இராமன் தத்துவத்தின் நிறமாலை

3.2 NMR நிறமாலை பகுப்பாய்வு

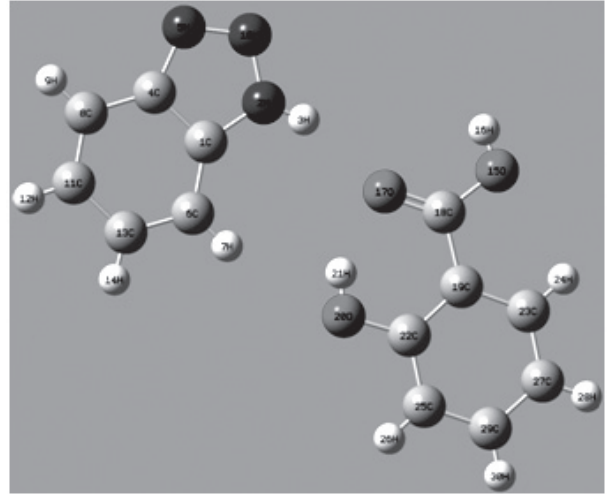
BSA சேர்மத்தின் வடிவமைப்பையும் மூலக்கூறு அமைப்பையும் வரைவதற்கு NMR நிறபிரிகை ஒருசிறந்த கருவியாக நிரூபிக்கப்பட்டுள்ளது. MeOD-ஐ கரைசலாக கொண்டு HNMR பகுப்பாய்வு நடத்தப்பட்டது. BSA-HNMR நிறமாலை (படம் 5)ல் $\delta = 5.1$ PPMல் உள்ள ஒற்றை P-ஹைட்ராக்சி பென்சோயின் அமிலத்தில் உள்ள ஹைட்ராக்சில் புரோட்டானுக்கு ஒதுக்கப்படுகிறது. $\delta = 7.44$ PPM to $\delta = 7.50$ PPMல் உள்ள பலகற்றைகள் சேர்மத்தில் 2, 3, 7, 8ல் உள்ள கரிம புரோட்டானால் ஏற்படுகிறது. $\delta = 7.8$ PPM ல் உள்ள பலகற்றை 1, 4, 6 பகுதியில் உள்ள கரிம புரோட்டானால் ஏற்படுகின்றது. $\delta = 6.9$ PPMல் உள்ள பலகற்றை P-ஹைட்ராக்சிபென்சோயிக் அமிலத்தில் 10ம் இடத்தில் உள்ள புரோட்டானை குறிக்கிறது.



படம் - 5: பென்சோட்ரியோசோல் சாலிசிலிக் அமிலத்தின் ^1H NMR நிறமாலை

3.3 மூலக்கூறு வடிவியல்

BSA சேர்மத்தின் மேம்படுத்தப்பட்ட பிணைப்பு நீளம் மற்றும் பிணைப்பு கோணங்களை B3LYP/6-31G (d,p) மூலம் அட்டவணை1ல் தரப்பட்டுள்ளது. மேலும் மொத்த குறைந்த ஆற்றல் அளவு 891.971a.u என அறியப்பட்டது. மூலக்கூறின் அமைப்பில் உள்ள அணுக்களின் எண்ணிக்கை மற்றும் பெயர்களோடு படம் -6ல் தரப்பட்டுள்ளது. வேங் மற்றும் பலர் (2012) எக்ஸ்-ரே விளிம்பு தகவல்கள் வடிவமைப்பை மேம்படுத்த தொடக்க புள்ளியாக எடுத்துக் கொள்ளப்பட்டது. மேம்படுத்தப்பட்ட அமைப்பில் உள்ள பிணைப்பு கோணம் மற்றும் பிணைப்பு நீளத்திற்கும் உள்ள சோதனைத் தகவல்களும் கணக்கிடப்பட்ட மதிப்புகளும் இரண்டிற்கும் ஒரு தொடர்பு இருப்பதை அறிய வைக்கின்றது.



அட்டவணை 1: B3LYP / 6-31 g (d, p)

அடர்த்தியான பென்சோடிரியோசோல்சாலிசிலிக் அமிலத்திற்கு உகந்ததாக இருக்கும்.

பினைப்புநீளம்	மதிப்புகள்(Å)	பினைப்புக்கோணங்கள்	மதிப்பு(°)
C1-N2	1.35949	C1-N2-10N	111.2764
1C-4C	1.39252	1C-4C-8C	120.8470
2N-10N	1.32865	6C-13C-11C	121.981
5N-10N	1.3090	2N-10N-5N	108.5894
22C-20O	1.3456	19C-22C-25C	120.080
C19-18C	1.4647	25C-29C-27C	120.904
18C-15O	1.30792	19C-23C-27C	120.9688
18C-17O	1.22111	19C-22C-20O	122.0902
19C-22C	1.3977	22C-19C-18C	118.6956
22C-25C	1.3831	170-18C-15O	124.199
25C-29C	1.3723		
29C-27C	1.3803		
23C-19C	1.39781		

3.4 HOMO மற்றும் LUMO ஆய்வுகள்

முன்னணியில் உள்ள மூலக்கூறு ஆர்ப்பிட்டால்களில் மிகுந்த நிரம்பிய மூலக்கூறு ஆர்பிடால் (HOMO) எலக்ட்ரான் கொடுப்பவைகளாகவும் குறைந்த நிரம்பாத மூலக்கூறு ஆர்பிடால் (LUMO) எலக்ட்ரான் ஏற்பவையாக நடக்கின்றன. மூலக்கூறின் நிலைப்புத்தன்மை மற்றும் வினைகளை HOMO மற்றும் LUMO ஆற்றல் நிர்ணயிப்பதில் முக்கிய பங்கு வசிக்கின்றன. கனிம மற்றும் கரிம மூலக்கூறுகளுக்கடையே உள்ள மின் பரிமாற்ற பண்புகளை HOMO மற்றும் LUMO ஆற்றல் வித்தியாசம் கண்டறிகிறது. பொதுவாக கடினமான மூலக்கூறு அதிகமான $E_{LUMO} - E_{HOMO}$ ஆற்றல் இடைவெளியும், மிருதுவான மூலக்கூறு குறைந்த $E_{LUMO} - E_{HOMO}$ இடைவெளியும் கொண்டுள்ளது. மூலக்கூறின் நிலைப்புத்தன்மை மற்றும் வினைத்

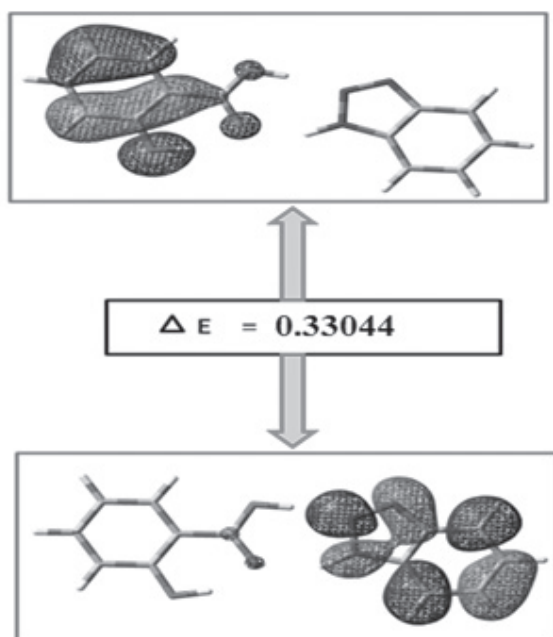
தன்மையை கடினத்தன்மையுடன் தொடர்புபடுத்த இயலும். வேதி கடினத் தன்மை $\rho = (I-A)/2$ எனவும் I மற்றும் A அயனிசேவின் ஆற்றல் மற்றும் எலக்ட்ரான் நாட்டம் எனப் படுகிறது, ($I = -E_{HOMO}$ மற்றும் $A = -E_{LUMO}$). கொடுக்கப்பட்டுள்ள தலைப்பு சேர்மத்தின் கணக்கிடப்பட்ட HOMO மற்றும் LUMO ஆற்றல் மற்றும் வேதிவினை விளக்கின் அட்டவணை 2-ல் தரப்பட்டுள்ளது. BSA சேர்மத்தின் HOMO மற்றும் LUMO வரைபடம் 6 ல்தரப்பட்டுள்ளது. நேர்மறை மற்றும் எதிர்மறை பகுதிகள் முறையே சிவப்பும் மற்றும் பச்சை நிறங்களில் காட்டப்பட்டுள்ளது. ஆற்றல் இடைவெளி மூலக்கூறுகளுக்கு இடையே உள்ள ஆற்றல் பரிமாற்ற இணைப்பையும் உயிரியில் நடவடிக்கைகளையும் பிரதிபலிக்கிறது. கணக்கிடப்பட்ட HOMO மற்றும் LUMO ஆற்றல் மதிப்புகள் -0.22646 மற்றும் -0.05569 ஆகும். ஆற்றல் இடைவெளி

சிறியதெனின் சிறிய கிளர்வு ஆற்றலைக் குறிக்கிறது. எனவே, கடின மூலக்கூறுகள் பெரிய இடைவெளியும் அதன் எலக்ட்ரான் அடர்த்தி மிருதுவான மூலக் கூறைவிட அதிகமான கடினத்தன்மையும் கொண்டதாக மாறிவிட்டது. வெவ்வேறு வினைத் தன்மை மற்றும் தேர்ந்தெடுப்பு தன்மைக் கொண்டு வேதி கடினத்தன்மை, வேதி ஆற்றல், மிருதுதன்மை, எலக்ட்ரான் கவர் தன்மை உட்கரு கவர் தன்மை, ஆகியவை கணக்கிடப்பட்டன. மூலக்கூறுகளின் நிலைப்புத்தன்மை மற்றும் வேதித்தன்மை

புரிந்துக் கொள்ள வேதிகடினத் தன்மை (η) சிறந்த கருவியாக பயன்பட்டது. மின்னணு வேதி ஆற்றல் (μ) ($\mu = E_{\text{LUMO}} + E_{\text{HOMO}}/2$) என்பது மூலக்கூறின் எலக்ட்ரான் கவர்த் தன்மைக்கு எதிர்மறை ஆகும். குளோபல் எலக்ட்ரோ ஃபிலிசிட்டி இன்டெக்ஸ் (ω), $\omega = \mu^2/2\eta$ வேதி மிருதுதன்மை (ζ) $\zeta = 1/2\eta$ தலைப்பு மூலக்கூறுக்கு எடுக்கப்பட்டது. குறைந்த $E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ ஆற்றல் இடைவெளி உள்ள மூலக்கூறு (மிருதுவான மூலக்கூறு) மிகுந்த வினைத்திறன் கொண்டது.

அட்டவணை 2 : கணக்கிடப்பட்ட ஆற்றல்கள், எல்லைப்புற சுற்றுப்பாதை ஆற்றல் மற்றும் இதன் இரசாயன எதிர்வினை விளக்கங்கள்.

Parameters	B3LYP/6-31G(d,p)
E_{HOMO} (eV)	-0.22646
E_{LUMO} (eV)	-0.05569
ΔE (eV)	0.33044
Hardness η (eV)	0.085385
Chemical potential μ (eV)	-0.141075
Electrophilicity ω (eV)	0.11654
Softness (ζ)	5.85582

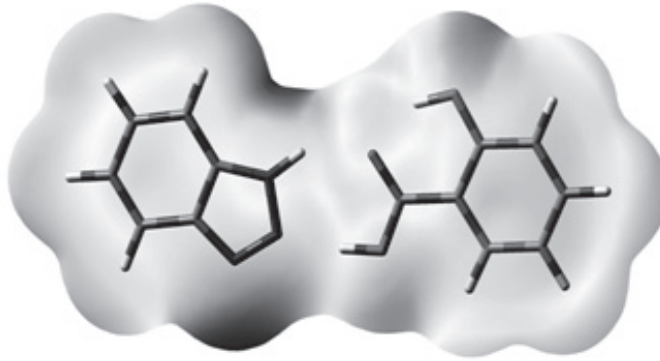


படம்-7:
பென்சோட்ரியோசோல்
சாலிசிலிக் அமிலத்தின்
HOMO - LUMO

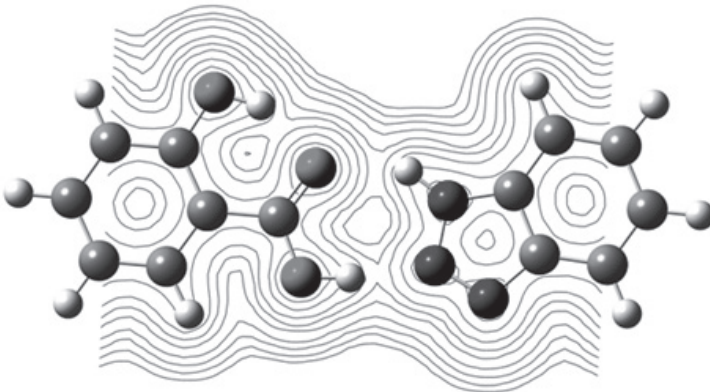
3.5 மூலக்கூறு மின்னியல் ஆற்றல்

மூலக்கூறு மின்னியல் ஆற்றல் (MEP) எலக்ட்ரானிக் அடர்த்தி வரைபடத்துடன் தொடர்பு படுத்தப்பட்டு, எலக்ட்ரோஃபிலிக் மற்றும் நியூக்ரோஃபிலிக் வினைகளுக்கிடையே உள்ள பண்பறி ஆய்வுக்கு உதவுகிறது. எலக்ட்ரான் அடர்த்தி மேற்பரப்பு வரைபடம் மின்னியல் ஆற்றல் மேற்பரப்புடன் சேர்ந்து மூலக்கூறின் அமைப்பு, அளவு ஆற்றல் அடர்த்தி பரிமாற்றம் மற்றும் வினைத்திறனை அறிய உதவுகிறது. MEP வரைபடம் உயிரி மூலக்கூறு மற்றும் மருந்து களுக்கு இடையே உள்ள ஹைட்ரஜன் பிணைப்பு, வினைத்திறன் மற்றும் அமைப்புத்திறன் தொடர்பினை விளக்குகிறது. படம் 7 மற்றும் 8 மூலக்கூறு மேற்பரப்பில் மின்னியல் ஆற்றலை காண்டோர் வரைபடம் கொண்டு காட்டப்பட்டுள்ளது. MEP வரைபடத்தில் எதிர்மறை (சிவப்பு மற்றும்

மஞ்சள்) பகுதிகள் எலக்ட்ரோ பிலிசிட்டி வினைத்திறனுக்கும் நீலநிற பகுதி நேர்மறை நியூக்ளியோபிலிசிட்டி வினைத் திறனுக்கும் தொடர்புபடுத்தப்பட்டுள்ளது. எதிர்மறை பகுதிகள் எலக்ட்ரான்சவர் அணுக் களுடன் பொதுவாக சேர்ந்துள்ளன. நேர்மறை பகுதிகள் MEP வரைபடத்தில் காப்பாட்சில் தொகுதியில் உள்ள ஆக்ஸீஜன் அணுக்களை சுற்றியுள்ள ஹைட்ரஜன் அணுக்களை பிரதிபலித்து எலக்ட்ரோபிலிக் தாக்குகலை குறிக்கிறது. நைட்ரஜன் அணுக்கள் உள்ள டிரைஅசோல் பகுதியில் மிகுந்த நேர்மறை பகுதி சேர்ந்திருப்பது நியூக்ளியோபிலிக் தாக்குதல் இடத்தையும் மற்றும் எலக்ட்ரான் இல்லா திருப்பதை குறிக்கிறது. மூலக்கூறின் இந்த பகுதி மூலக்கூறுக்கிடையே உள்ள தொடர்பினை உறுதிப்படுத்துகிறது.



படம்- 8 (அ) :
மூலக்கூறு மின்னியல்
திறனைக் கொண்ட
மொத்த எலக்ட்ரான்
அடர்த்தி ஐசோ
அமைப்பு மேற்பரப்பில்
வரைபடம்.



படம்- 8 (ஆ) :
பென்சோட்ரியோசோல்
சாலிசிலிக்
அமிலத்தின் மின்னியல்
நிலைத்தன்மையின்
மேலோட்ட வரைபடம்

3.6 மிகஉயர்ந்த தளவிளைவு மற்றும் இருமுனை இயக்கம்

மோதல்தூண்டப்பட்ட நிறமாலையின் அடிப்படையிலான ஆய்வுகளை புரிந்து கொள்வதற்கும் விளக்கத்திற்கும் மின்னணு துருவப்படுத்துதல் மற்றும் மிகஉயர்ந்த விளைவு முக்கியத்துவம் வாய்ந்தது (பிரின்னாம்பம் மற்றும் பலர் 1985). காசியன் 09 வெளியீட்டைப் பயன்படுத்தி முதல் வரிசையில் மிக உயர்ந்த அளவுகோல் கணக்கீடு 10 கூறுகளை முறையே Bxxx, Bxxy, Bxyy, Byyy, Bxxz, Bxyz, Byyz, Bxzz, Byzz, மற்றும் Bzzz வழங்குகிறது. முதல்நிலை உயர்ந்த தள விளைவு B மூன்றாம் நிலையில் 3x3x3 அணியாக விவரிக்கப்படுகிறது.

முதல் நிலை தளவிளைவு மற்றும் இருமுனை இயக்கம் ஆகியன கொடுக்கப்பட்ட தலைப்பு சேர்மத்திற்கு DFT கணக்கீடுகள் மூலம் வரையறுக்கப்பட்டு அட்டவணை 3ல் தரப்பட்டுள்ளது அட்டவணை மதிப்புகளிலிருந்து Byyy திசையில் உயர்தளவிளைவு டிஸ்க் கலைஷேனினால் அதிகமாக உள்ளதை அறிய முடிகிறது. μ_y ன் அதிகமான மதிப்பு மூலக்கூறு களுக்கிடையே உள்ள ஹைட்ரஜன் இணைப்பினால் இருக்கலாம்.

மிக உயர்ந்த தளவிளைவு கணக்கீட்டிற்கான முதல் வரிசை சமன்பாடு காசியன்09 வெளியிலிருந்து பெறப்பட்டது. Bவின் தனி மதிப்பை கூறும்பொழுது, பொதுவாக 3 தனி Bமதிப்புகளை பிதகோரியன் முறையில் தந்து சராசரியை சமன்செய்து அறியப்பட்டது.

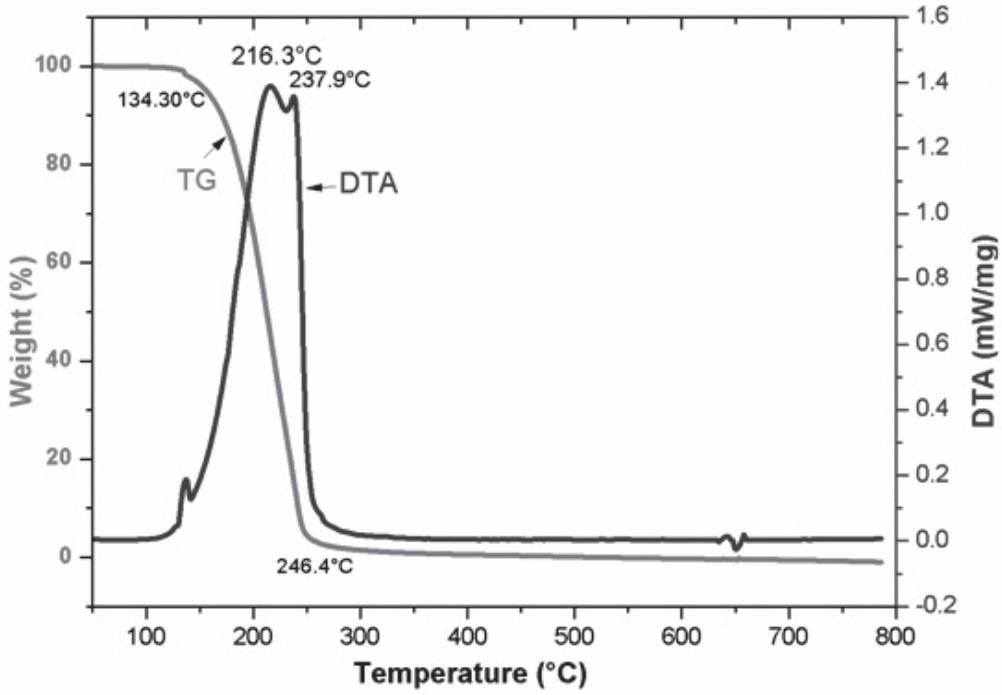
இருமுனை இயக்கம் பண்பினை மூலக்கூறுகளின் துருவமுண்டு தீர்மானிக்கிறது. இரு முனை இயக்கம் மூலக்கூறின் வடிவத்தை பற்றிய தீர்வை அளிக்கிறது ஏனெனில் இரு முனை இயக்கம் மூலக்கூறின் வடிவமைப்பை சார்ந்ததாகும். மொத்த நிலையான இருமுனை μ இயக்கம் கணக்கிட முடியும்.

அட்டவணை -3 : பென்சோட்ரியோசோல் சாலிசிலிக் அமிலத்தின் மிக உயர்ந்த அளவுகோல் மற்றும் இருமுனை மாறும் மதிப்புகள்

β_{xxx}	-22.4960
β_{xyy}	-7.3267
β_{zzz}	4.3077
β_{yyy}	11.8066
β_{yzz}	0.5303
β_{yxx}	1.9269
β_{zzz}	0.0019
β_{xxx}	-0.0468
β_{xyy}	0.0215
β_{total}	29.07
μ_x	-1.6236
μ_y	1.4656
μ_z	0.0007
μ_{total}	2.18

3.7 வெப்ப ஆய்வு

BSA சேர்மத்தின் வெப்பநிலைப்புதன்மை தெர்மோகிராலிமேட்ரிக் ஆய்வு மூலமும் கூழு மற்றும் டிப்பெரென்சியல் தெர்மல் ஆய்வு (DTA) மூலம் அறியப்பட்டு படம் 9ல் காட்டப்பட்டுள்ளது. TG வளைவு அந்த பொருள் 35 முதல் 800°C வரை வெப்பப்படுத்துவதன் மூலம் ஏற்படும் ஏடை குறைவினைக் காட்டுகிறது. அந்தப்பொருள் 134°C வரை நிலையாகவும் ஒரு நிலை எடை குறைவு கொண்டு கொண்டிருப்பதையும் TG வளைவு காட்டுகிறது. சேர்மம் 134°C ல் சிதையத் தொடங்குகிறது. TG வளைவு காண்பித்த மாற்றங்களையே DTA வளைவும் காட்டுகிறது. தெர்மோகிராமிலிருந்து 216°Cல் வெப்ப உமிழ் உச்சம் சேர்மத்தின் சிதைவுப்புள்ளியை ஒத்துள்ளது.



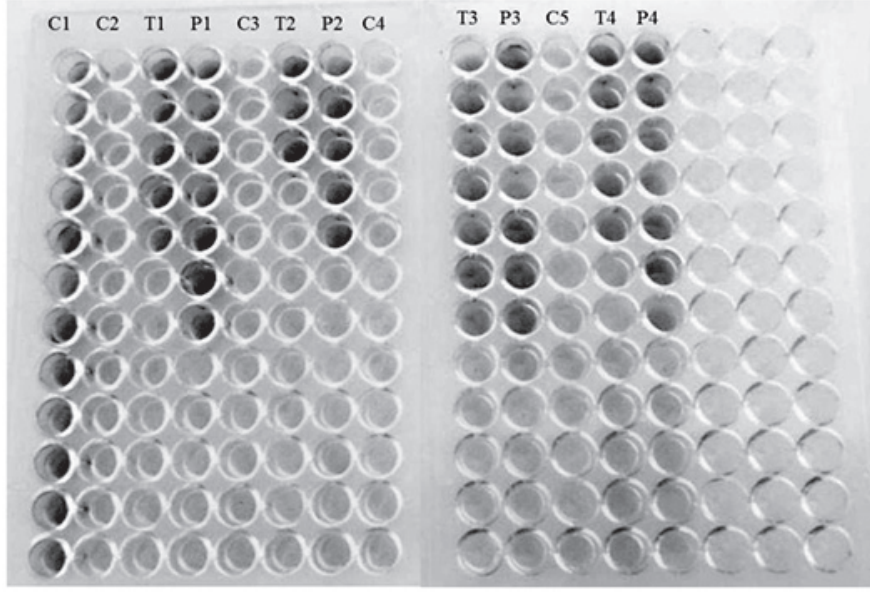
படம்- 9 : பென்சோட்ரியோசோல்சாலிசிலிக் அமிலத்தின் கலவை TG DTA வளைவு

3.8 பாக்டீரியா எதிர்ப்பு செயல்திறன் :

படம் 10 சேர்மத்தின் பாக்டீரியா எதிர்ப்பு செயல்திறனையும் அதனை சேர்ந்த குறைந்த தடுக்கும் செறிவினையும் (MIC) காட்டுகிறது. சேர்மத்தின் மதிப்புகள் அட்டவணை 4-ல் தரப்பட்டுள்ளது. BSA சேர்மத்தின் குறைந்தபட்ச தடுப்பு செறிவு (MIC) தீர்மானிக்க ஒரு புதிய ரெசசுரீன் ஒடுக்க மதிப்பீடு முறை உருவாக்கப்பட்டது. கொடுக்கப்பட்டுள்ள சேர்மத்தின் MIC கண்டறிய ரெசசுரீன் சாயம் கொண்டு கிராம் பாஸிடீவ் மற்றும் கிராம் நெகட்டீவ் மாதிரியோடு பயன்படுத்தப்பட்டது. நுண்ணுயிர் செல்கள் பயன்பாட்டில் இருப்பதை ரெசசுரீன்கரைசல் நீலத்திலிருந்து இளஞ்சிவப்பு நிறத்திற்கு மாறுவதிலிருந்து அறியப்படுகிறது. நுண்ணுயிர் செல்களில் உள்ள என்சைம் ஆக்ஸிடோ-ரிடக்டேல்ரெசசுரீன்-ஐ இளஞ்சிவப்பு ரெசசுரூவின் ஆக மாற்றுகிறது. தேக்கப்பட்ட நிலையில் சேர்மம் பாக்டீரியில் செல்களை கொல்கிறது. இதனை நீல அல்லது இளஞ்சிவப்பு நிற சாயச் தொட்டிகளில் இருந்து அறியலாம்.

தொட்டிகளில் இளஞ்சிவப்பு நிறத்திலிருந்து B SA சேர்மம் சேர்ந்ததிலிருந்து சாத்தியமான செல்கள் இருப்பதை குறிக்கிறது. எனவே அந்த சேர்மத்தின் MIC மதிப்பு குறைந்த நீர்த்த நிலையில் நீல நிறம் தங்கி இருப்பதை எடுத்துக் கொள்ளப்படுகிறது. இந்த பரிசோதனையில் பரிசோதிக்கப்பட்ட கலவை பாக்டீரியா நோய்கிருமிகளுக்கு எதிராக செயல்படுகிறது.

டெஸ்ட்டிக் பொருட்களின் MIC மதிப்புகள் எஸ் கெரிச்சியா கோவைக்கு எதிராக ஸ்டே ஹைலோக்ஸ்அர்ஸ் 25µg/ml-ற்கு எதிராக 6.25µg/ml, 1.56µg/ml அட செரிஸிற்கு எதிராகவும் 625µg/ml அட கல்ப்சியெல்லாநிமோனியாவுக்கு எதிராகவும் உள்ளன. கொடுக்கப்பட்ட சேர்மம் பேஸிலஸ் செரிஸிக்கு எதிராக மிகச் சிறந்த செயல்பாடுகளை காட்டியது. இந்த சோதனை கலவை குறிப்பாக கிராம் நேர்மறை பாக்டீரியா விற்கு எதிராக சிறந்த பாக்டீரியா எதிர்ப்பு நடவடிக்கைகளை மேற்கொண்டது மற்றும் இந்த வகைப்பாடு மேலும் ஆராய்ச்சியை மேம்படுத்த வழிவகுக்கிறது.



படம்- 10 : ரெசுசுரின் குறைப்பு மதிப்பீட்டின் மூலம் பாக்டீரியாவின் BSA இன் MIC

- C1- control - Compound + dye + without bacteria
 C2- control - dye + Staphylococcus aureus + without compound
 C3 – control – dye + Escherichia coli + without compound
 C4 – control – dye + Bacillus cereus + without compound
 C5 – control – dye + Klebsiella pneumonia + without compound
 T1 – Compound + dye + Staphylococcus aureus
 T2 – Compound + dye + Escherichia coli
 T3 – Compound + dye + Bacillus cereus
 T4 – compound + dye + Klebsiellapneumoniae
 P1 – Streptomycin + dye + Staphylococcus aureus
 P2– Streptomycin + dye + Escherichia coli
 P3 – Streptomycin + dye + Bacillus cereus
 P4 – Streptomycin + dye + Klebsiella pneumonia

அட்டவணை -4 : Resazurin குறைப்பு மதிப்பீடு மூலம் சோதனை கலவைகள் குறைந்தபட்ச தடுப்பு செறிவு:

MIC $\mu\text{g/mL}$				
Test material	Bacterial pathogens			
	Staphylococcus aureus	Escherichia coli	Bacillus cereus	Klebsiellapneumoniae
Test material	6.25	25	1.56	6.25
Streptomycin	1.56	6.25	1.56	1.56

4. முடிவு

BSA தனிபடிக்கம் மெதுவாக நீராவிவாக்குதல் கரைசல் வளர்ச்சி முறை மூலம் வளர்க்கப்பட்டது. கொடுக்கப்பட்டுள்ள தனி சேர்மத்தின் அதிர்வு நிறமலை (FTIR) மற்றும் இராமன் கற்றை சோதனை மூலமும் கோட்பாடு கணக்கீடு (DFT/B3LYP)கீழ் ஆய்வு செய்யப்பட்டுள்ளது. சேர்மத்தினுள் நடைபெறும் ஆற்றல் பரிமாற்றத்தை கணக்கிடப்பட்ட HOMO மற்றும் LUMO வரைபடங்களை கொண்டு காட்டப்பட்டுள்ளது.

மூலக்கூறு மின்னியல் திறன் மூலம் மேற்பரப்பு கணக்கிடப்படுகிறது. HNMR மூலம் புரோட்டான் களின் எண்ணிக்கை ஆராயப்படுகிறது. வெப்ப ஆய்வுகள் BSA சேர்மம் 134°C வரை நிலையாக உள்ளதை காட்டுகிறது. BSA மூலக்கூறுகளின் உயிரியல் நடவடிக்கை பேஸில்லஸ் சீரீஸ் பாக்டீரியாவின் மிகச்சிறந்த சாத்தியமுள்ள தடுப்பானாக உள்ளது. இந்த கண்டுபிடிப்புகள் புதிய டிரையோசோல் சேர்மங்களை சுவாராசியமான உயிரியல் செயல்பாடுகளுடன் வடிவமைக்க வழி வகுக்கிறது.

மேற்கோள்கள் :

- [1] Pandeya, S.N, Sriram, D, Nath, G & DeClercq, E 1999, 'Synthesis, antibacterial, antifungal and anti-HIV activities of Schiff and Mannich bases derived from isatin derivatives and N-[4-(4?-chlorophenyl)thiazol-2-yl] thiosemicarbazide', European Journal of Pharmaceutical Sciences, Vol. 9, no. 1, pp. 25 - 31.
- [2] Dua, R, Shrivastava, S, Sonwane S.K & Srivastava, S.K 2011, 'Pharmacological Significance of Synthetic Heterocycles Scaffold: A Review', Advances in Biological Research, Vol. 5 no. 3 pp. 120-144.
- [3] Srivastavaa, A.K, Kumara, A, Misraa, N, Manjulab, P.S, Sarojinic, B.K & Narayanac, B 2016, 'Synthesis, spectral (FT-IR, UV-visible, NMR) features, biological activity prediction and theoretical studies of 4-Amino-3-(4-hydroxybenzyl)-1H-1,2,4-triazole-5(4H)-thione and its tautomer', Journal of Molecular Structure ,Vol.1107, no. 5, pp. 137-144.
- [4] Kale, R.R, Prasad, V, Mohapatra, P.P & Tiwari, V.K 2010, 'Recent developments in benzotriazole methodology for construction of pharmacologically important heterocyclic skeletons, Monatshefte für Chemie, Vol. 141, no. 11, pp. 1159-1182.
- [5]. Karaca, C, Atac, A & Karabacak, M 2015, 'Conformational analysis, spectroscopic study (FT-IR, FT-Raman, UV,1H and 13C NMR), molecular orbital energy and NLO properties of 5-iodosalicylic acid', Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy Vol. 136, pp. 295-305.
- [6]. Guo, Z.H, Yin, Y, Wang, C, Fei Wang, P, Tao Zhang, X, Chang Wang & Liang Zhu, Z.H 2015, 'Design, synthesis and molecular docking of salicylic acid derivatives containing metronidazole as a new class of antimicrobial agents', Bioorganic & Medicinal Chemistry, Vol. 23, no.18, pp. 6148-6156.
- [7]. Wang, L Zhao, L, RuiYu Xue, XiFeng Lu, YongHong Wen, Yang, Y 2012, 'Construction of interesting organic supramolecular structures with synthons cooperation in the cocrystals of 1H-benzotriazole and hydroxybenzoic acids', Science China Chemistry, Vol. 55, pp. 2515-2522.
- [8]. Birnbaum G 1985, Phenomena Induced by Intermolecular Interactions, Plenum, New York.