सैद्धांतिक एवं अभिकलनात्मक रसायन विज्ञान विषय पर बीएआरसी न्यूज़लेटर जनवरी-फरवरी 2024 अंक में सम्मिलित तकनीकी आलेखों के सारांश

1

अत्याधुनिक रसायन विज्ञान अनुसंधान में सैद्धांतिक और अभिकलनात्मक रसायनिकी का महत्व

निहारेंदु चौधरी[1,2]

[1]सैद्धांतिक रसायन विज्ञान अनुभाग, रसायन विज्ञान प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे-400085, भारत

[2]होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर , मुंबई-400094, भारत

सारांश

रसायन विज्ञान में अनुसंधान निस्संदेह रूप से हमारे दैनिक जीवन में अत्यंत महत्वपूर्ण भूमिका निभाता है। उदाहरण के लिए, कुछ उत्पाद जिनका हम नियमित रूप से उपयोग करते हैं, जिनमें टूथपेस्ट, साबुन, कपड़े, दवाएं और हमारा भोजन भी शामिल हैं, वे सभी किसी न किसी तरीके से रसायन विज्ञान से संबंधित हैं। इसलिए, रसायन विज्ञान में अनुसंधान हमारे दैनिक जीवन के विभिन्न पहलुओं को विकसित करने और आगे बढ़ाने में हमारी मदद करता है। परम्परागत रूप से रसायन विज्ञान को एक प्रायोगिक विषय माना जाता है। इसलिए, यह सवाल उठाना काफी प्रासंगिक है कि क्या और कैसे सैद्धांतिक और अभिकलनात्मक रसायनिकी वास्तव में काम करता है, और यह भी कि क्या रसायन विज्ञान अनुसंधान की इस शाखा की आवश्यकता है। इस लेख में, हम इन मुद्दों पर संक्षेप में चर्चा करेंगे और इस प्रक्रिया में, रसायन विज्ञान में आधुनिक शोध के शुरुआती दौर में सैद्धांतिक और अभिकलनात्मक रसायनिकी की जरूरतों पर भी प्रकाश डालेंगे। परमाणु ऊर्जा विभाग के कार्यक्रमों से संबंधित अंतर-विषयक अनुसंधान के क्षेत्रों में सैद्धांतिक और अभिकलनात्मक रसायनिकी की महत्वपूर्ण भूमिका पर भी प्रकाश डाला गया है। **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 15 देखें।)**

2

न्यूरोट्रांसमीटर, सिल्वर नैनोकणों की सतह पर सेरोटोनिन का अधिशोषण: एक सतह-संवर्धित रमन स्कैटरिंग और डीएफटी अध्ययन

रिधिमा चड्ढा[1,2], अभिषेक दास[1,2] और नंदिता मैती[1,2]

[1] विकिरण एवं फोटोकैमिस्ट्री प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे-400085, भारत

[2] होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर , मुंबई-400094, भारत

सारांश

अधिशोषण में बेहतर जानकारी के साथ-साथ फिजियोलोजी स्तर विशेष के लिए कम सांद्रता पर न्यूरोट्रांसमीटर का पता लगाने के लिए सेरोटोनिन के सतह-संवर्धित रमन स्कैटरिंग (एसईआरएस) और घनत्व अभिलक्षकीय सैद्धांतिक (डीएफटी) अध्ययनों की जांच की गई। चांदी के नैनोकणों की सतह पर सेरोटोनिन की संवेदन संसूचन के अतिरिक्त, संगणित और प्रयोगात्मक रमन स्पेक्ट्रम के बीच अच्छे सहसंबंध ने क्रमशः ठोस और जलीय विलयन में तटस्थ और ज़्विटरियोनिक रूपों में सेरोटोनिन की उपस्थिति दर्शायी। एसईआरएस और डीएफटी परिणामों ने ऑक्सीजन/हाइड्रॉक्सिल साइट के माध्यम से संभावित अधिशोषण के साथ चांदी के नैनोकणों की सतह पर मुख्य रूप से अपचयित तटस्थ (ऋणायन) रूप में विश्लेष्य की उपस्थिति को भी दर्शाया। **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 20 देखें।)**

3

नाभिकीय ईंधन, अपशिष्ट प्रबंधन, और विकिरण क्षति के लिए मल्टीस्केल मॉडलिंग और सिमुलेशन

तिजो वज़ालप्पिल्ली*[1,2], अरूप के. पाठक[1,2], महेश सुंदरराजन[1,2] , बृंदाबन मोदक[1,2],
श्रीनिवासु कंचर्लापल्ली[1,2] और निहारेंदु चौधरी*[1,2]
[1]सैद्धांतिक रसायन विज्ञान अनुभाग, रसायन प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे - 400085, भारत
[2]होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर , मुंबई-400094, भारत

सारांश

नाभिकीय पदार्थों का कम्प्यूटेशनल मॉडलिंग अपरिहार्य है क्योंकि इनमें से अधिकतर पदार्थों का उपयोग उच्च तापमान, उच्च दाब, उच्च विकिरण प्रवाह और संक्षारक रासायनिक पर्यावरण जैसी चरम स्थितियों में किया जाता है, जो सतत प्रयोगात्मक अध्ययन को कठिन बनाता है। अब, मजबूत सैद्धांतिक विधियों और उन्नत कम्प्यूटेशनल तकनीकों के विकास के साथ, विभिन्न प्रयोगात्मक अनुसंधान के समर्थन के लिए सुरक्षित और लागत प्रभावी पद्धति से सैद्धांतिक और अभिकलनात्मक रसायनिकी का उपयोग करके नाभिकीय पदार्थों के गुणधर्मों का सफलतापूर्वक निर्धारण किया जा सकता है। नाभिकीय अनुप्रयोगों से संबंधित पदार्थों को, प्रारंभिक, अर्ध-अनुभाविक इलेक्ट्रॉनिक संरचना गणना, शास्त्रीय आण्विक गतिकी, गतिज मोंटे कार्लो सिमुलेशन, परिमित तत्व और मशीन लर्निंग विधियों की सहायता से, इलेक्ट्रॉनिक से लेकर परमाणु से लेकर मेसोस्कोपिक तक, विभिन्न लंबाई के पैमाने पर प्रतिरूपित किया जा सकता है। वर्तमान लेख में, नाभिकीय ईंधन चक्र के पश्च एवं अग्र भाग दोनों को शामिल करते हुए पऊवि के मुख्य क्षेत्रों पर रासायनिकी वर्ग, भापअ केंद्र में किए गए विविध अभिकलनात्मक रसायनिकी अनुसंधान की एक झलक प्रदान की गई है। विशेष रूप से, हमारा शोध एक तरफ प्रगत नाभिकीय ईंधन के अभिकलनात्मक अभिकल्पन, भुक्तशेष ईंधन पुनर्प्रसंस्करण और अपशिष्ट प्रबंधन के लिए नए लिगैंड और विलायकों के विकास और दूसरी तरफ विकिरण क्षति और ईंधन प्रदर्शन में निम्नन की अंतर्निहित उत्पत्ति को समझने से संबंधित है। **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 24 देखें।)**

4

ऊर्जा रूपांतरण और भंडारण के लिए कम्प्यूटेशनल मॉडलिंग

बृंदाबन मोदक*[1,2] , श्रीनिवासु कंचर्लापल्ली[1,2] , तिजो वज़ापिल्ली और केआरएस चंद्रकुमार
[1] सैद्धांतिक रसायन विज्ञान अनुभाग, रसायन प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे - 400085, भारत
[2] होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर, मुंबई- 400094, भारत

सारांश

इस आलेख में निवल-शून्य लक्ष्यों की दिशा में हरित ऊर्जा मिशन से संबंधित सैद्धांतिक रसायन विज्ञान अनुसंधान गतिविधियों का एक संक्षिप्त विवरण प्रस्तुत किया गया है। विशेष रूप से, सौर ऊर्जा रूपांतरण के लिए नवीन पदार्थों के अभिकल्पन से संबंधित सैद्धांतिक और कम्प्यूटेशनल अध्ययन, जिसमें फोटोकैटलिटिक जल विपाटन के माध्यम से सौर हाइड्रोजन उत्पादन, उपयोगी ईंधन के रूप में सौर CO_2 का रूपांतरण, और फोटोवोल्टाइक अनुप्रयोग, हाइड्रोजन के प्रतिवर्ती भंडारण के लिए दक्ष पदार्थों का विकास शामिल है और सॉलिड-स्टेट बैटरी पर चर्चा की गई है। यहां चर्चा किए गए कार्य के पूरे स्पेक्ट्रम में समायोजनीय गुणधर्मों के साथ नवीन पदार्थों का अभिकल्पन और प्रथम सिद्धांत क्वांटम यांत्रिक विधियों का उपयोग करके जटिल परिघटनाओं का निरूपण शामिल है। **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 30 देखें।)**

5

स्वास्थ्य सेवा अनुसंधान: कंप्यूटर सहायतित औषधि निर्माण

महेश सुंदरराजन[1,2] एवं ए.के. पाठक*[1,2]
[1] सैंद्धांतिक रसायन विज्ञान अनुभाग, रसायन विज्ञान प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रांबे-400085, भारत
[2] होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर, मुंबई- 400094, भारत

सारांश

हमारे समूह में हाल के वर्षों में किए गए स्वास्थ्य सेवा से संबंधित अनुसंधान का एक संक्षिप्त विवरण यहां प्रस्तुत किया गया है। सुपर कंप्यूटर, सुदृढ़ सांख्यिकीय यांत्रिकी आधारित विधियों और द्रुत सैद्धांतिक एल्गोरिदम के आगमन के साथ, अभिकलनात्मक रसायनिकी अनुसंधान अब स्वास्थ्य सेवा में एक अभूतपूर्व भूमिका निभाता है और परमाणु ऊर्जा विभाग के कार्यक्रमों से इसकी सीधी प्रासंगिकता है। जैविक परिघटनाओं और जैविक प्रक्रियाओं के अंतर्निहित भौतिक सिद्धांतों की समझ जो अन्यथा प्रयोगों के माध्यम से प्राप्त करने योग्य नहीं हैं, को बड़े पैमाने पर ऑल-एटम आणविक गतिशीलता सिमुलेशन और क्वांटम यांत्रिक विधियों को नियोजित करके अनुसंधान किया जाता है। **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 34 देखें।)**

6

गहन गलनक्रांतिक विलायकों में सूक्ष्म विसरण तंत्र

एच. श्रीनिवासन[1,2], वी.के. शर्मा[1,2] और एस. मित्रा*[1,2]
[1]ठोस अवस्था भौतिकी प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे-400085, भारत
[2]होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर , मुंबई-400094, भारत

सारांश

औद्योगिक और फार्मास्युटिकल अनुप्रयोगों में व्यापक रूप से उपयोग किए जाने वाले गहरे गलनक्रांतिक विलायकों (डीईएस) में अभी भी सूक्ष्म दृष्टिकोण से उनके भौतिक रासायनिक गुणधर्मों की पूरी समझ का अभाव है। डीईएस का उपयोग करने वाले अनुप्रयोगों का नियंत्रण व दक्षता उनके अभिगमन गुणधर्मों पर महत्वपूर्ण रूप से निर्भर करती है। इस लेख में, हम सूक्ष्म विसरण क्रियाविधि को उजागर करने वाले डीईएस पर हमारे अनुकरण और सैद्धांतिक अध्ययनों को प्रस्तुत करते हैं जो उनके सूक्ष्म अभिगमन गुणधर्मों के निर्गमन में अंतर्दृष्टि प्रदान करते हैं। आण्विक अंत:क्रिया द्वारा निभाई गई महत्वपूर्ण भूमिका पर ध्यान केंद्रित करते हुए हम जांच करते हैं कि डीईएस के गुणधर्म उनके घटकों और संरचना पर कैसे निर्भर करते हैं। इसके अतिरिक्त, हम इन प्रणालियों में जल की सांद्रता और आण्विक विसरण दर के बीच सह-संबंध का विश्लेषण करने के लिए जल द्वारा इन अंत:क्रिया के मॉडुलन का पता लगाते हैं। हमारे निष्कर्ष बताते हैं कि डीईएस में जटिल निर्माण और बलगतिकी की गहन समझ आण्विक विसरण से निर्गमन संमष्टि अभिगमन गुणधर्मों की व्याख्या करने के लिए आवश्यक कड़ी प्रदान कर सकती है। **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 38 देखें।)**

7

रसायन विज्ञान के भविष्य को आकार देती नई सैद्धांतिक रसायन विज्ञान विधियाँ

वाई. सजीव[1,2] , तिजो वज़हपिल्ली[1,2] , श्रीनिवासु कंचर्लापल्ली[1,2] , अरूप के. पाठक[1,2], और मलाया के. नायक[1,2]

[1] सैद्धांतिक रसायन विज्ञान अनुभाग, रसायन प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे - 400085, भारत

[2] होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर , मुंबई - 400094, भारत

सारांश

नवीनतम सैद्धांतिक पद्धतियों और कम्प्यूटेशनल एल्गोरिदम का उपयोग आज रसायन विज्ञान अनुसंधान को नई ऊंचाइयों पर ले जा रहा है। इन उल्लेखनीय नई प्रगति ने सैद्धांतिक रसायन विज्ञान को छोटे आण्विक प्रणालियों के आद्यावस्था रसायन विज्ञान के परंपरागत क्षेत्र से आगे बढ़ने में सक्षम बनाया है, जिससे नवीन प्रयोगों को प्रस्तावित करने की अनुमति मिली है। अधिक सटीकता के साथ, यह अब इलेक्ट्रॉनों की सापेक्ष गति को ध्यान में रखते हुए बड़े आण्विक प्रणालियों की उत्तेजित-अवस्था और यहां तक कि निरंतर-अवस्था रसायन विज्ञान का निर्धारण किया जा सकता है। इन नए सैद्धांतिक विकासों के साथ कृत्रिम बुद्धिमत्ता और मशीन लर्निंग के एकीकरण ने सैद्धांतिक रसायन विज्ञान को विज्ञान का एक शक्तिशाली और स्वतंत्र क्षेत्र बना दिया है। यह लेख सैद्धांतिक रसायन विज्ञान अनुभाग, रसायन विज्ञान प्रभाग, भापअ केंद्र द्वारा इन क्षेत्रों में की गई नवीनतम क्रमगत प्रगति पर प्रकाश डालता है।

(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 42 देखें।)

8

एकल परमाणु मिश्र धातु उत्प्रेरण: प्रत्यक्ष ज्ञान और अभिकल्पन

संदीप निगम*[1,2] और चिरंजीब मजूमदार[1,2]

[1]रसायन विज्ञान प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे-400085, भारत

[2]होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर , मुंबई-400094, भारत

सारांश

उत्प्रेरक पदार्थ ऊर्जा एवं पर्यावरणीय संधारणीयता के लिए महत्वपूर्ण हैं। अभिकलनात्मक पदार्थ विज्ञान नवीन और कुशल उत्प्रेरक पदार्थ को अभिकल्पित करने के लिए अपरिहार्य उपकरण रहा है। एकल परमाणु उत्प्रेरण, उत्प्रेरक की दक्षता को अधिकतम करने के सिद्धांत पर आधारित है। वर्तमान लेख नए उभरते क्षेत्र 'सिंगल एटम अलॉय कैटलिस्ट्स (SAAC)' का सामान्य परिचय प्रदान करता है। इसके बाद सल्फ्यूरिक एसिड अपघटन अभिक्रिया (सल्फर -आयोडीन (एसआई) ताप रसायन चक्र का सबसे ऊष्माशोषी चरण) के लिए एकल परमाणु मिश्रधातु उत्प्रेरक को अभिकल्पित करने में हमारा अभिकलनात्मक प्रयास प्रस्तुत किया गया है। **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 47 देखें।)**

9

डाइफिनाइल डाइचैल्कोजन प्रणाली की संरचना और गुणधर्मों पर अतिरिक्त इलेक्ट्रॉन का प्रभाव

दिलीप कुमार मैती[1,2]

[1]निदेशक का कार्यालय, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे-400085, भारत

[2]होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर , मुंबई-400094, भारत

सारांश

अतिरिक्त इलेक्ट्रॉन की उपस्थिति में $(R\text{-}X)_2$ (R=Ph, $PhCH_2$; X=S, Se) प्रकार के सल्फर और सेलेनियम आधारित डाइचाल्कोजन प्रणाली की संरचना और गुणधर्मों को स्पष्ट करने के लिए मूलाधार क्वांटम रासायनिक तरीकों को नियोजित किया जाता है। जल माध्यम में इन दो-केंद्र तीन-इलेक्ट्रॉन (2c-3e) 3बंधित प्रणालियों की स्थिरता पर फिनाइल रिंग में इलेक्ट्रॉन निकालने वाले ($-NO_2$) और इलेक्ट्रॉन प्रदान करने वाले ($-CH_3$) समूहों के प्रभाव पर चर्चा की गई है। यह रिपोर्ट दर्शाती है कि इलेक्ट्रॉनिक प्रभाव और ज्यामितीय लचीलेपन का संयोजन इन प्रणालियों में 2c-3e बंधन का सामर्थ्य निर्धारित करता है और यह अध्ययन ऋणात्मक डाइचाल्कोजन प्रणाली के एंटीऑक्सीडेंट गुणधर्मों को समझने में भी सहायता करता है । **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 51 देखें।)**

10

नाभिकीय पदार्थों की अभिकलनात्मक ऊष्मागतिकी

पी.एस. घोष[1,2], के. अली[1,2] और एके आर्य*[1,2]

[1]ग्लास और प्रगत पदार्थ प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे - 400085, भारत

[2] होमी भाभा राष्ट्रीय संस्थान, अणुशक्तिनगर , मुंबई - 400094, भारत

सारांश

वर्तमान पीढ़ी के नाभिकीय रिएक्टरों के बेहतर प्रदर्शन और प्रगत पीढ़ी-IV रिएक्टरों की प्राप्ति के लिए, वांछित गुणधर्मों वाले नए पदार्थों का विकास अत्यंत महत्वपूर्ण है। नाभिकीय ईंधन चक्र के विभिन्न चरणों के लिए नए पदार्थों का अभिकल्पन और विकास चुनौतीपूर्ण है क्योंकि, संवृत्त ईंधन चक्र के अग्र और पश्च भाग के लिए नाभिकीय ईंधन के प्रहस्तन में रेडियो-विषाक्तता की संभावना होती है। अभिकलनात्मक ऊष्मागतिकी, किसी तापमान और संरचना श्रेणी में नाभिकीय पदार्थों के मौलिक ऊष्मागतिकी गुणधर्मों को निर्धारित करने के लिए एक अद्‌वितीय अवसर प्रदान करता है जो अन्य प्रयोगों द्‌वारा प्राप्त नहीं किया जा सकता है। नए पदार्थों के अभिकल्पन करने, संरक्षा पहलुओं का विश्लेषण करने और रिएक्टर प्रचालन स्थितियों में पदार्थों के प्रदर्शन का अनुकरण करने के लिए उच्च तापमान ऊष्मागतिकी गुणधर्म आवश्यक हैं। वर्तमान लेख में, घनत्व अभिलक्षकीय सिद्‌धांत (डीएफटी) और शास्त्रीय आण्विक गतिशीलता (एमडी) आधारित अनुकरण कार्यनीतियों का उपयोग करके पदार्थों के अभिकल्पन और विकास के तीन पहलुओं पर विस्तृत चर्चा की गई है। सबसे पहले, $U_{1-x}\ Np_x\ O_2$ / $Th_{1-x}\ Np_x\ O_2$ मिश्रित ऑक्साइड ईंधन के तापीय गुणों का अध्ययन व्यापक तापमान और संरचना श्रेणी पर तापीय गुणधर्म डेटासेट विकसित करने के उद्‌देश्य से प्रस्तुत किया गया है। दूसरे, नई पीढ़ी के रिएक्टरों के लिए नई संरचनात्मक पदार्थ खोजने के उद्‌देश्य से नए न्यून-सक्रियण उच्च उत्क्रम माप मिश्रधातुओं के अभिकल्पन सिद्‌धांतों को विस्तारपूर्वक प्रस्तुत किया गया है। अंत में, Fe-Zr अंतर-धातुक मिश्रधातुओं में विखंडन धातुओं के समावेश/विलयन के ऊर्जाविज्ञान पर, उच्च स्तरीय नाभिकीय धात्विक अपशिष्टों के अंतर्गत Fe-Zr मिश्रधातुओं को अपशिष्ट के रूप में प्रोफाइल करने के उद्‌देश्य से, चर्चा की गई है। **(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 56 देखें।)**

11

परमाण्विक प्रतिरूपण संचालित (गंध रहित, धूम्र रहित और शून्य विषाक्तता) प्रयोगशाला प्रयोग

एस.के. मुशर्रफ अली
परमाण्विक प्रतिरूपण और रासायनिक विश्लेषण अनुभाग, रसायन अभियांत्रिकी वर्ग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे - 400085, भारत

सारांश

परमाण्विक प्रतिरूपण (मॉडलिंग) के उपकरणों का उपयोग करके आण्विक संयोजन का नाभिकीय अभिकल्पन एवं अभियांत्रिकी, विज्ञान और अभियांत्रिकी के विभिन्न क्षेत्रों में अनुप्रयोग के लिए बहुत उपयोगी और लोकप्रिय हो गया है। इस अभिकलनात्मक परमाण्विकी प्रतिरूपण संरचनात्मक, यांत्रिक, तापभौतिकी और गतिशील गुणधर्मों के मात्रात्मक निर्धारण करने की क्षमता के कारण बहुत मांग बन गई है जो प्रयोगात्मक निष्कर्षों की व्याख्या करने और नए प्रयोगों की योजना बनाने में उपयोगी हैं। वर्तमान लेख परमाण्विकी प्रतिरूपण के प्रदर्शन पर केंद्रित है जिसमें परमाणु ऊर्जा विभाग के अनुप्रयोगों से संबंधित क्वांटम इलेक्ट्रॉनिक संरचना गणना, परंपरागत और मूलाधार आण्विक गतिशीलता अनुकरण और सांख्यिकीय यांत्रिकी शामिल हैं जो परमाण्विक प्रतिरूपण एवं रासायनिक विश्लेषण अनुभाग, भापअ केंद्र के रसायन अभियांत्रिकी वर्ग में किए गए।

(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 61 देखें।)

12

सैद्धांतिक रसायन विज्ञान: आधुनिक प्रवृत्तियों पर एक अवलोकन

चंद्र एन. पात्रा
विश्लेषणात्मक रसायन विज्ञान प्रभाग, भाभा परमाणु अनुसंधान केंद्र (भापअ केंद्र), ट्रॉम्बे-400085, भारत

सारांश

सैद्धांतिक और अभिकलनात्मक रसायनिकी, रसायन विज्ञान में अनुसंधान का एक अभिन्न अंग है और अब यह संबद्ध विषयों के साथ अपने अंतरापृष्ठ के माध्यम से अंतर्विषयी अनुसंधान के अग्रणी क्षेत्रों में एक प्रमुख योगदाता के रूप में भी उभर रहा है। शक्तिशाली कम्प्यूटेशनल संसाधनों की उपलब्धता के साथ, जटिल प्रणालियों की संरचना और गतिशीलता का निर्धारण करना और विभिन्न अनुप्रयोगों के लिए वांछित गुणधर्मोंके साथ नए अणुओं और पदार्थों को अभिकल्पित करना अब एक सपना नहीं रह गया है। इस प्रयास में एक बड़ी चुनौती पदार्थों और घटनाओं के विवरण में निहित विभिन्न लंबाई और समयमान के लिए विभिन्न उपकरणों का उपयोग करने की आवश्यकता से उत्पन्न होती है। वर्तमान समीक्षा का उद्देश्य सभी प्रक्षेत्रों को एकीकृत करना है; सूक्ष्मदर्शी प्रक्षेत्र, जहां क्वांटम यांत्रिकी के श्रोडिंगर समीकरण के समाधान के माध्यम से प्राप्त होने वाली इलेक्ट्रॉनिक संरचना प्रासंगिक है, जबकि मध्यवर्ती मध्याकार लंबाई पैमाने में, गति के परंपरागत समीकरण, सांख्यिकीय यांत्रिक विवरण और परमाण्विकी अनुकरण आमतौर पर उपयोग किए जाते हैं और स्थूल लंबाई पैमाने में, सांतत्यक यांत्रिकी पर्याप्त हो सकती है।

(पूरे लेख के लिए पृष्ठ संख्या 66 देखें।)