

# $\gamma$ -Işınlara Maruz Bırakılan 4-Metilbenzilamin Glioksim Tek Kristalinin EPR ve Simülasyon Tekniği ile İncelenmesi

Ülkü AKPINAR, Hüseyin YÜKSEL, Bilge YILDIRIM\*, Mehmet BİREY\*\*  
Selçuk Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik, 42075 Selçuklu, KONYA  
\*Selçuk Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya, 42075 Selçuklu, KONYA  
\*\* Ankara Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik, Tandoğan, 06600 ANKARA

## ÖZET

$\gamma$  – ışınlarına maruz bırakılan 4-Metil Benzilamin Glioksim (4-MBG) tek kristallerinin elektron paramanyetik rezonansı, manyetik alanda kristalin farklı yönelimleri için gözlenmiş ve analiz edilmiştir. 4-MBG tek kristalleri 100 K ve 400 K arasındaki sıcaklıklarda incelenmiştir. g-faktörünün ortalama değeri ve aşırı ince yapı yarılmasının değerleri sırası ile  $g=1,999$ ,  $a_N = 14G$ ,  $a_{H(NH)} = 13,5G$  ve  $a_{CH_2} = 7,5G$  olarak bulunmuştur. Çiftlenmemiş elektronun  $\rho_{N(NH)} = 0,5$  ve  $\rho_{H(NH)} = 0,5$  ile sırasıyla azot ve hidrojen üzerinde lokalize olduğunu ölçümler göstermiştir. Çiftlenmemiş elektron ile protonlar ve azotun g değeri ve aşırı ince yapı etkileşme sabitleri EPR ve simülasyon tekniği ile belirlenmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** EPR, Spektroskopik Yarılma Faktörü; g, Aşırı İnce Yapı Etkileşme Sabiti; a , Spin Yoğunluğu;  $\rho$ .

## The Investigation of $\gamma$ - Irradiated Single Crystal of 4-Methyl Benzylamine Glyoxime by EPR and Simulation Technique

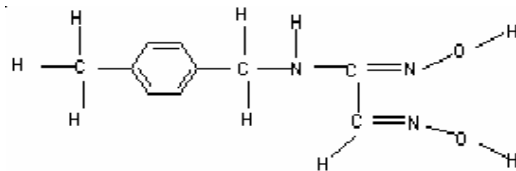
### ABSTRACT

The electron paramagnetic resonance of  $\gamma$  – irradiated single crystal of 4-Methyl Benzylamine Glyoxime(4-MBG) has been observed and analysed for different orientations of the crystals in a magnetic field. 4-MBG single crystal has been investigated at the temperatures between 100 and 400 K. The spectra were found to be temperature independent. Principal values of the g and the hyperfine splitting tensors and their direction cosines are given in the Table 1. The average values of g-factor and the hyperfine splittings were found to be  $g = 1,999$ ,  $a_N = 14G$ ,  $a_{H(NH)} = 13,5G$  and  $a_{CH_2} = 7,5G$  respectively. The measurements indicate that  $\rho_{N(NH)} = 0,5$  and  $\rho_{H(NH)} = 0,5$  of the unpaired electron are localized on nitrogen and hydrogen respectively. The g-values and the hyperfine coupling constants of the unpaired electron with the protons and nitrogen were determined by EPR and simulation technique.

**Keywords:** EPR, Spectroscopic Splitting Factor; g, Hyperfine Coupling Constant; a , Spin Density;  $\rho$ .

### 1. GİRİŞ

Metilamin ve türevlerinden oluşan serbest radikaller üzerine EPR çalışmaları uzun süredir devam etmektedir. Kimyasal yapısında N ve H atomları bulunduğu için radyasyona karşı aşırı duyarlılık gösteren metilamin tuzu ve türevleri EPR çalışan araştırmacıların ilgisini çekmektedir. Metilamin ve türevleri biyolojik ve kimyasal öneme sahiptir. Çalışma grubumuzun kimyasal olarak sentezlenen 4-metil benzilamin glioksim (MBG) maddesinin Elektron Paramanyetik Rezonans özelliklerini araştırmaya karar vermesinde biyolojik ve kimyasal olarak radyasyonun bu maddeler üzerine olan etkisinin önemli olmasının ciddi payı vardır. Bu çalışmada kimyasal yapısı;



olan örneğin bozulma mekanizması sonuç ve tartışma bölümünde ayrıca verilecektir.

### 2. DENEYSEL YÖNTEM

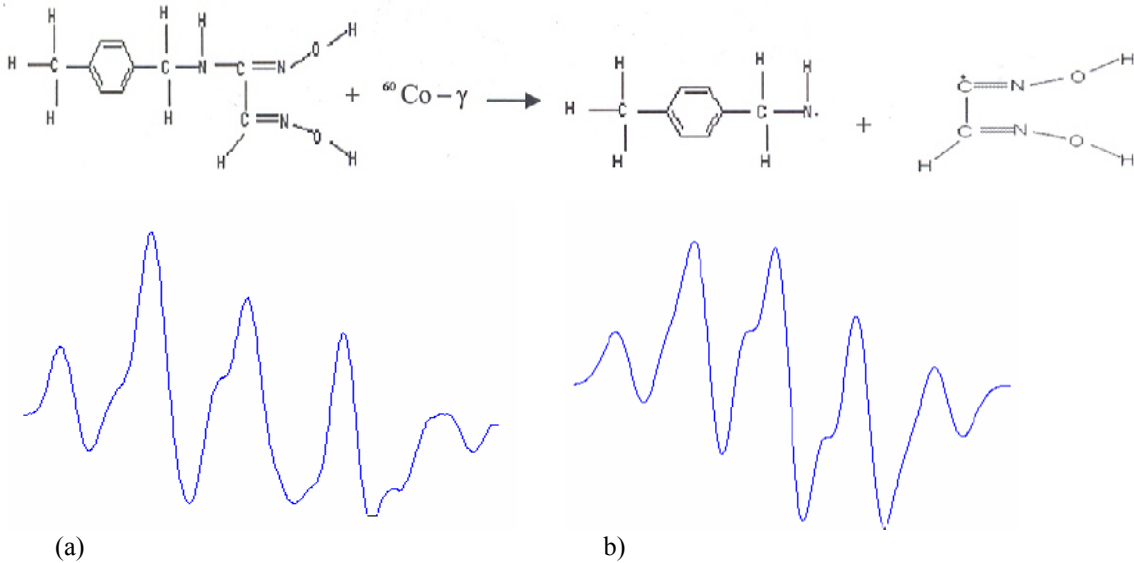
4-metil benzilamin glioksim maddesi etanol çözeltilisi kullanılarak kristallendirilmiştir. Elde edilen küçük beyaz tek kristaller 1,63 kGray enerjili  $^{60}\text{Co}-\gamma$  kaynağında 7 gün süreyle ışınlanmıştır. Işınlamadan

önce beyaz olan tek kristaller ışınılandıktan sonra mor renk almaktadır. Işınlanan tek kristaller arasından düzgün yapılı olanı seçilmiş ve EPR spektrumları alınmıştır. Bu deney 100 K - 400 K sıcaklık aralığında 2mW mikrodalga gücünde olan Varian model E-109C ESR spektrometresi kullanılarak yapılmıştır.

### 3. SONUÇ VE TARTIŞMA

$\gamma$  - ışınlarına maruz bırakılan MBG tek kristallerinden elde edilen radikalin EPR spektrumları 100 K - 400 K sıcaklık aralığında incelenmiş, spektrumların

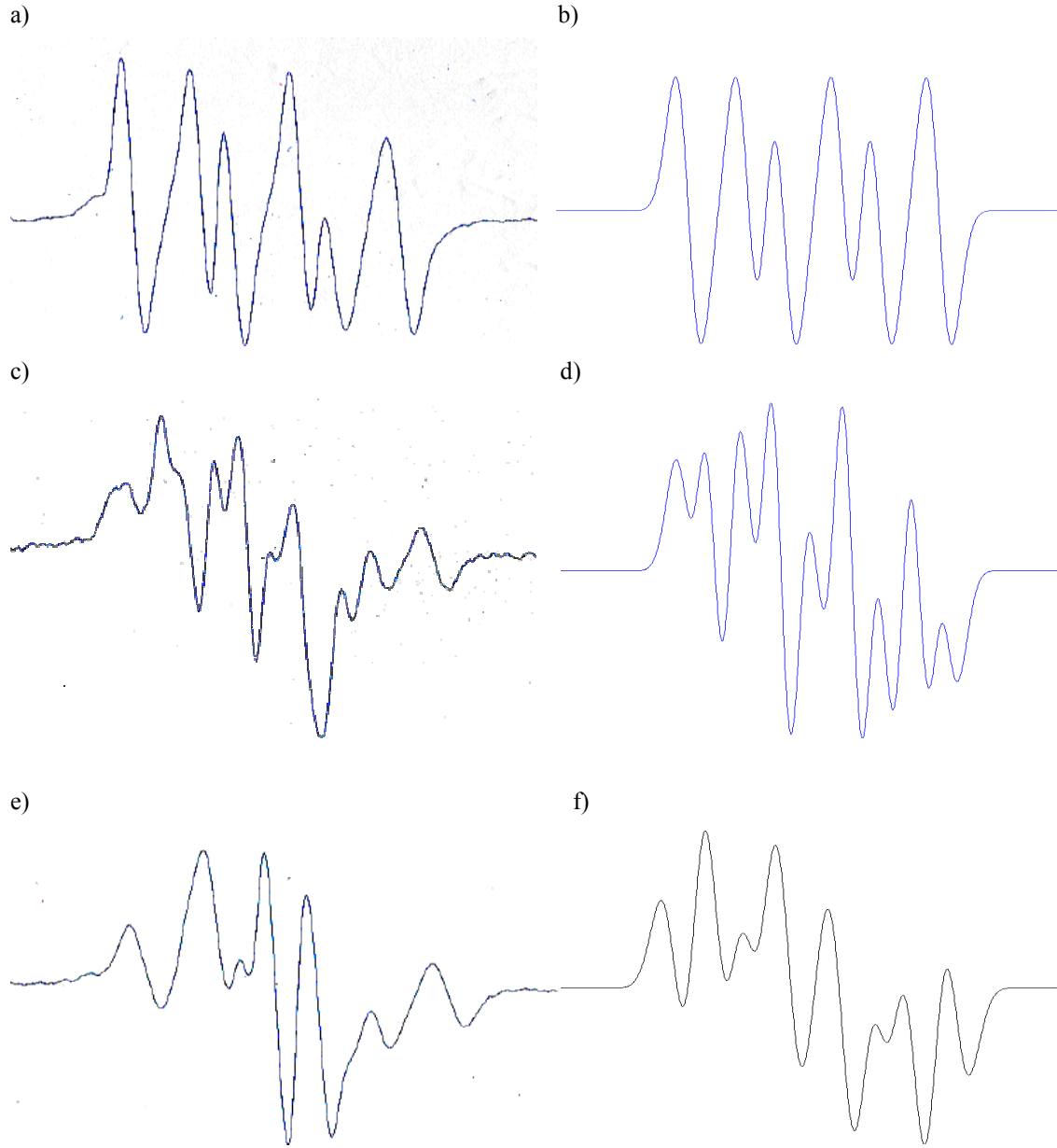
$R-CH_2\dot{N}H$  radikaline ait spektroskopik yarıлма faktörü ile aşırı ince yapı etkileşme sabitleri Tablo 1 de verilmiştir.  $R-CH_2\dot{N}H$  radikali için azota bağlı protonun yarıлма sabiti yaklaşık 13,5 G , azotun yarıლması yaklaşık 14 G ve  $a_{CH_2} = 7,5 G$  bulunmuştur. Lineer yapıdaki moleküllerde bu yarıлма değerleri geniş bir yelpazeye dağılmış olmasına rağmen literatürle kıyasladığımızda bu değerlerin literatürle uyum içinde olduğu görülmektedir (1-6).



Şekil 1. MBG tek kristalinin 9.761 GHz frekans ve 295 K sıcaklığında (a) H//x yönelimindeki spektrumu (b) Bu spektrum için yapılan simülasyon

Tablo1. MBG tek kristallerinde tespit edilen  $R-CH_2\dot{N}H$  radikaline ait EPR parametreleri

	Hesaplanan değerler	Doğrultu Kosinüsleri
$A_N (G)$	$a_{xx} = 16,9$ $a_{yy} = 16,5$ $a_{zz} = 8,9$ $a_{av} = 14,1$	$\begin{pmatrix} 0,813181559 & -0,453768280 & -0,364458640 \\ 0,572483341 & 0,736462951 & 0,360395817 \\ 0,104874096 & -0,501713733 & 0,858652872 \end{pmatrix}$
$A_H (G)$	$a_{xx} = 15,1$ $a_{yy} = 13,7$ $a_{zz} = 11,6$ $a_{av} = 13,5$	$\begin{pmatrix} 0,426453573 & 0,904254906 & 0,021457268 \\ -0,138784690 & 0,088856732 & -0,986328186 \\ -0,893798725 & 0,417645239 & 0,163390007 \end{pmatrix}$
$A_{CH_2} (G)$	$a_{xx} = 12,8$ $a_{yy} = 6,7$ $a_{zz} = 3,1$ $a_{av} = 7,5$	$\begin{pmatrix} 0,061280570 & 0,983845147 & 0,168206477 \\ -0,533713147 & 0,174706421 & -0,827422469 \\ -0,843442332 & -0,039069088 & 0,535797199 \end{pmatrix}$
g	$g_{xx} = 2,000363111$ $g_{yy} = 1,998762292$ $g_{zz} = 1,998069894$ $g_{av} = 1,999065101$	$\begin{pmatrix} 0,377552957 & 0,755643020 & -0,535217143 \\ -0,590837459 & -0,248462546 & -0,767578961 \\ -0,712997098 & 0,606028043 & 0,352654433 \end{pmatrix}$

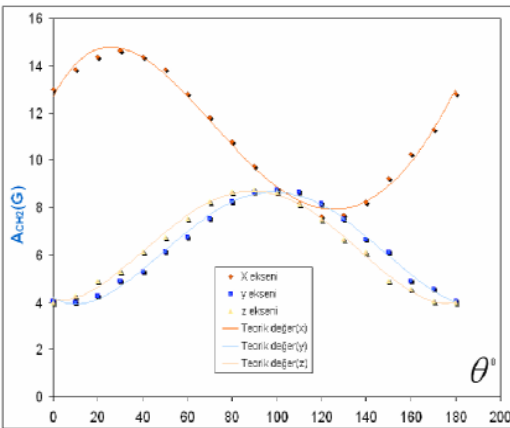
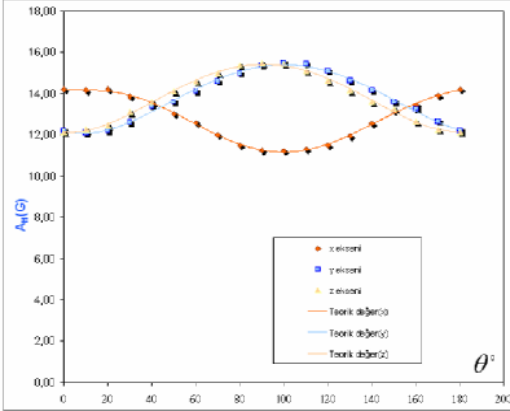
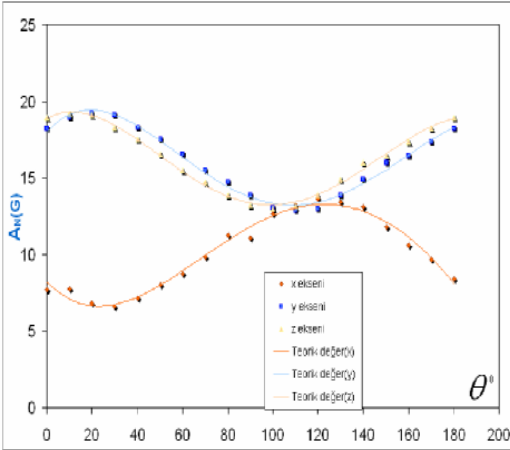
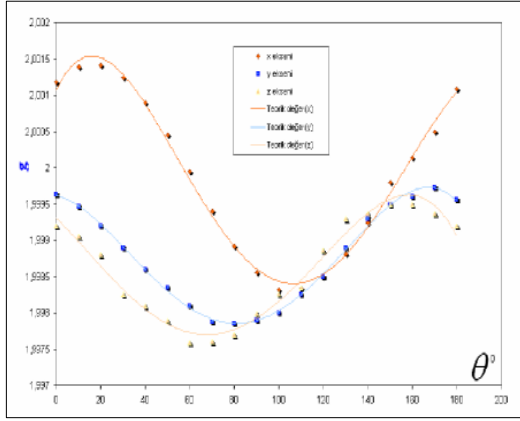


Şekil 2. MBG tek kristallerine ait EPR spektrumları ve bu spektrumların simülasyonları, (a) y eksenini  $30^\circ$ , (b) y eksenini  $30^\circ$  simülasyonu, (c) y eksenini  $150^\circ$ , (d) y eksenini  $150^\circ$  simülasyonu, (e) y eksenini  $100^\circ$ , (f) y eksenini  $100^\circ$  simülasyonu

Ayrıca radikale ait parametreler kullanılarak simülasyon tekniğiyle  $R-CH_2\dot{N}H$  radikalinin teorik spektrumları çizdirilmiştir. Değişik açılarda simülasyonu yapılan spektrumlar ile deneysel olarak elde edilen spektrumlar Şekil 2 de görülmektedir.

Ayrıca azot ve protonların üzerindeki spin yoğunlukları Mc-Connell eşitliği  $a = \rho.Q$  kullanılarak

bulunmuştur (7).  $R-CH_2\dot{N}H$  radikalindeki azota bağlı hidrojenin, azotun ve  $CH_2$  nin  $g(\theta)$  ve  $A(\theta)$  eğrileri en küçük kareler yöntemi kullanılarak çizdirilmiştir. Bu eğriler Şekil 3 te verilmektedir. Spektroskopik yarımlama sabiti  $g$ 'nin değeri DPPH standart örneğinin değeri olan  $g=2,00036$  ile kıyaslanarak düzeltilmiştir.



Şekil 3.  $R-CH_2\dot{N}H$  radikalinin  $g(\theta)$  ve  $A(\theta)$  grafikleri

#### 4. KAYNAKLAR

1. Birey, M., Aktaş, H ve Zengin, D. M. (1994). Z.“ESR of Gamma Irradiation Damage Centers in Single Crystals of Thriethana Lamine Hydrochloride” Naturforsch., 49(a), 946-948.
2. Zengin, D.M., Birey, M., Aktaş, H., Hancer, A. ve Murathan, A. M. (1996). “ESR of Gamma Irradiation Damage Centers in Single Crystals of Some Glutamic Acid Derivatives” Z. Naturforsch., 51(a), 895-897.
3. Cyr, N, ve Lin, W. C. (1969). “Electron Spin Resonance of a Sigma-Electron Radical in X-Ray- Irradiated Malonomide” J Chem. Phys., 50, 3701.
4. Lau, P. W. ve Lin, W. C. (1969). “Electron Spin Resonance of Two Radicals Formed in X-Irradiated Cyanocetylurea, Another Sigma-Electron Radical of the RCONH Type” J. Chem. Phys., 51, 5139.
5. W.M.Fox ve P.Smith, “Structure of Radicals Formed from Formamide, Hydroxyurea, and Malonamide” J.Chem. Phys., 48, 1868 (1968).
6. H.W. Shield, P.Hamrick, ve W. Redwine, “Electron Spin Resonance of X-Irradiated Single Crystals of Hydroxyurea” J.Chem.Phys., 46, 2510 (1967).
7. Mc Connell, H. M ve Chesnut, D. B. (1958). “Theory of Isotropic Hyperfine Interactions in  $[\dot{I}]$ -electron Radicals J. Chem. Phys., 28, 107.

