

Atıf İçin: Başkan, M. H. (2025). Gama ile Işınlanmış Alanin Türevlerinde EPR Parametrelerinin Literatür Tabanlı Karşılaştırmalı Çalışması. *İğdır Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 15(3), 946-959.

To Cite: Başkan, M. H. (2025). A Literature-Based Comparative Study of EPR Parameters in Gamma-Irradiated Alanine Derivatives. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 15(3), 946-959.

Gama ile Işınlanmış Alanin Türevlerinde EPR Parametrelerinin Literatür Tabanlı Karşılaştırmalı Çalışması

Mehmet Halim BAŞKAN^{1*}

Öne Çıkanlar:

- Alanin Türevleri
- EPR Parametreleri
- Amino Asit

Anahtar Kelimeler:

- Gama Işınlaması
- EPR Spektroskopisi
- Serbest Radikaller

ÖZET:

Bu çalışmada, gama ışınlamasına maruz bırakılan alanin türevlerinde oluşan serbest radikallerin Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) parametreleri karşılaştırmalı olarak incelenmiştir. Çalışmada incelenen bileşikler arasında L-alanil glisin (LAG), N-metil-L-alanin (NMLA), N-metil-DL-alanin (NMA), Ala-ala, L-alanin etil ester hidroklorür (LAES), L-alanin metil ester hidroklorür (LAME), DL-alanin etil ester hidroklorür (DLA), L-alaninamid hidroklorür (LAHCl), N-asetil-L-alanin (ALA), L- α -alanin etil ester (LAEE) ve Alanil-L-glutamin (ALG) toz örnekleri bulunmaktadır. Örnekler, kobalt-60 (⁶⁰Co) gama kaynağı kullanılarak 12-36 kGy doz aralığında ışınlanmış ve ışınlama sonrası serbest radikal oluşumları EPR spektroskopisi ile analiz edilmiştir. Elde edilen spektrumlar, g değerleri ve aşırı ince yapı sabitleri (a değerleri) kullanılarak karşılaştırılmış, radikal yapılarının belirlenmesi için simülasyon çalışmaları gerçekleştirilmiştir. Ayrıca incelenen örneklerin biyolojik özellikleri de kapsamlı bir şekilde tartışılmıştır. Analizler, gama ışınlamasının incelenen alanin türevlerinde benzer serbest radikaller oluşturduğunu ortaya koymuştur. Tüm bileşiklerde elde edilen g değerleri 2.0028 ile 2.0044 arasında değişmektedir, bu da gama ışınlamasının alanin türevlerinde benzer radikal oluşum mekanizmalarına yol açtığını göstermektedir. Aşırı ince yapı sabitleri (a değerleri), bileşikte bulunan fonksiyonel gruplara bağlı olarak farklılık göstermiştir. Bazı bileşiklerde ortak radikal türlerinin oluştuğu belirlenmiştir. EPR spektrumlarının analizi, ışınlama sonrası farklı bileşiklerde farklı çizgi yoğunluk dağılımları olduğunu göstermiştir. Çoğu bileşikte 1:4:6:4:1 yoğunluk oranına sahip beş çizgili spektrumlar elde edilmiştir. Ayrıca, yapılan simülasyon çalışmaları, deneysel olarak elde edilen spektrumlarla yüksek uyum göstermiştir. Örneklerde oluşan serbest radikallerin oda sıcaklığında kararlılıkları incelenmiş ve çoğu bileşikte radikal türlerinin birkaç ay boyunca stabil kaldığı belirlenmiştir. Bu durum, gama ışınlaması sonrası serbest radikal oluşumunun biyolojik sistemler, farmasötik ürünler ve gıda koruma süreçleri açısından uzun süreli etkiler yaratabileceğini göstermektedir. Sonuç olarak, bu çalışma, gama ışınlamasının organik bileşiklerde oluşturduğu serbest radikal türlerini anlamaya önemli bir katkı sağlamaktadır. Elde edilen veriler, biyomedikal araştırmalar, farmasötik formülasyonlar, radyasyon dozimetresi ve gıda endüstrisi gibi birçok alanda gama ışınlamasının etkilerini değerlendirmek açısından kritik bilgiler sunmaktadır.

A Literature-Based Comparative Study of EPR Parameters in Gamma-Irradiated Alanine Derivatives

Highlights:

- Alanin Derivatives
- EPR Parameters
- Amino Acid

Keywords:

- Gamma Irradiation
- EPR Spectroscopy
- Free Radicals

ABSTRACT:

In this study, the Electron Paramagnetic Resonance (EPR) parameters of free radicals formed in alanine derivatives exposed to gamma irradiation were comparatively analyzed. The compounds examined in the study include L-alanyl glycine (LAG), N-methyl-L-alanine (NMLA), N-methyl-DL-alanine (NMA), Ala-Ala, L-alanine ethyl ester hydrochloride (LAES), L-alanine methyl ester hydrochloride (LAME), DL-alanine ethyl ester hydrochloride (DLA), L-alaninamide hydrochloride (LAHCl), N-acetyl-L-alanine (ALA), L- α -alanine ethyl ester (LAEE), and Alanil-L-glutamine (ALG) in powder form. The samples were irradiated in the dose range of 12–36 kGy using a cobalt-60 (⁶⁰Co) gamma source, and free radical formation after irradiation was analyzed using EPR spectroscopy. The obtained spectra were compared using g-values and hyperfine coupling constants (a-values), and simulation studies were conducted to determine the radical structures. Furthermore, the biological properties of the examined samples were discussed in detail. The analyses revealed that gamma irradiation leads to the formation of similar free radicals in the alanine derivatives studied. The g-values obtained for all compounds ranged between 2.0028 and 2.0044, indicating that gamma irradiation induces similar radical formation mechanisms in alanine derivatives. The hyperfine coupling constants (a-values) varied depending on the functional groups present in the compounds, and some common radical species were identified across multiple compounds. The analysis of EPR spectra demonstrated that different line intensity distributions were observed in different compounds after irradiation. In most compounds, five-line spectra with an intensity ratio of 1:4:6:4:1 were obtained. Additionally, the simulation studies showed a high level of agreement with the experimentally obtained spectra. The stability of the free radicals formed in the samples at room temperature was also investigated, revealing that the radical species remained stable for several months in most compounds. This suggests that free radical formation due to gamma irradiation may have long-term effects on biological systems, pharmaceutical products, and food preservation processes. In conclusion, this study provides significant insight into the types of free radicals generated in organic compounds by gamma irradiation. The obtained data offer critical information for evaluating the effects of gamma irradiation in various fields, including biomedical research, pharmaceutical formulations, radiation dosimetry, and the food industry.

¹Mehmet Halim BAŞKAN (Orcid ID:0000-0001-9288-4947), Dicle Üniversitesi, Ziya Gökalp Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Diyarbakır, Türkiye

*Sorumlu Yazar/Corresponding Author: Mehmet Halim BAŞKAN , e-mail: hbaskan@dicle.edu.tr

GİRİŞ

Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) tekniği, yüksek enerjili radyasyonla oluşturulan bozulma merkezlerinin ömrünü ve hüviyetini tespit etmede yaygın olarak kullanılmaktadır (Sütçü ve Aydın, 2024; Sütçü ve Osmanoğlu 2023; Sütçü 2019).

Alanin (Ala), kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$ olan bir amino asittir ve proteinlerin temel yapı taşlarından biri olan 20 temel amino asitten biridir. Şekli, bir α -amino asit olup, bir amino grubu ($-\text{NH}_2$), bir karboksil grubu ($-\text{COOH}$) ve bir metil grubundan ($-\text{CH}_3$) oluşan bir yan zincir içerir. Alanin, L-alanin formunda bulunur ve vücutta genellikle protein sentezi için kullanılır.

Alanin, vücudun enerji metabolizmasında, protein sentezinde ve glukoz üretiminde önemli bir amino asittir. Bu yüzden hem genel sağlığı hem de performansı artırmaya yönelik vücutta pek çok biyolojik işlevi vardır. Vücudun farklı biyolojik süreçlerinde etkin bir şekilde yer alarak, özellikle kaslar, karaciğer, beyin ve bağışıklık sistemi için kritik bir bileşendir.

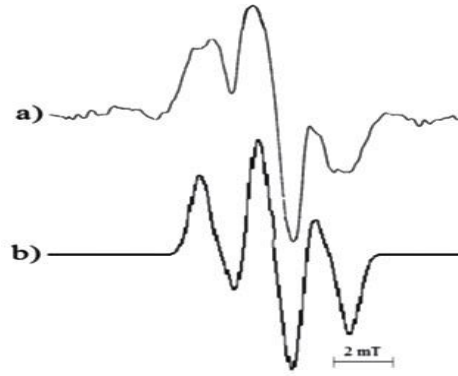
Alanin, vücutta proteinlerin yapı taşı olarak görev alır. Kaslar tarafından salınan en önemli amino asitlerden biridir ve vücuttaki doku bölgelerinden karaciğere nitrojen transferinde önemli rol oynar. Hemen hemen tüm proteinler alanin içerir.

Örnekler ^{60}Co γ (gama)-ışını kaynağı ile oda sıcaklığında çeşitli doz oranlarında (12-36 kGy) ışınlanmışlardır. g değerleri (spektroskopik yarımla faktörü) dipenhylicrylhydrazyl (DPPH) örneği (g = 2.0036) ile karşılaştırılarak hesaplanmıştır. Spektrumlar simülasyon programı ile simüle edilmişlerdir (McKelvey, 1987). Toz örneklerin spektrumları çeşitli aralıklarla ölçülerek, radikallerin kararlılığı (5 gün-4 ay arası) tespit edilmiştir.

L-Alanil-Glisin(LAG)

L-Alanil-Glisin, bir dipeptit bileşiği olup, L-alanin ve glisin amino asitlerinin birleşiminden oluşur. Bu molekül, özellikle biyolojik ve farmasötik sistemlerde önemli bir rol oynar. L-Alanil-Glisin'in biyolojik özellikleri ve önemi, vücuttaki çeşitli biyolojik süreçlere olan etkisi nedeniyle oldukça çeşitlidir. L-Alanil-Glisin, protein sentezi, enerji metabolizması, sinir sistemi işlevleri ve hücrel sağlık gibi birçok biyolojik süreçte kritik bir rol üstlenir. Ayrıca, terapötik potansiyel taşıyan bir bileşik olarak, kollajen üretimi, ağrı yönetimi, bağışıklık desteği ve antioksidan koruma gibi alanlarda kullanımı araştırılmaktadır.

L-alanil glisin'in kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CONHCH}_2\text{COOH}$ şeklinde olup, örnek 20 kGy dozunda gama ışınları ile ışınlanmıştır. L-alanil glisin'in EPR spektrumu Şekil 1(a), azotun aşırı ince yapı etkileşme sabiti spektrumun çizgi genişliğine çok yakın değerde olduğu için yaklaşık bir üçlü(triplet) oluşturduğu belirlenmiştir. CH, NH ve N çekirdeklerinin aşırı ince yapı etkileşmeleri, çizgi genişlemesi nedeniyle çalışmada gözlenmediği ifade edilmiştir. N çekirdeği ile olan etkileşimler sadece çizgilerin genişlemesine yardımcı olur. Spektrum, gama ışınları ile ışınlanmış L-alanil glisinde oluşan radikal $\dot{\text{C}}\text{H}_2\text{CHNH}$ radikale atfedilmiştir. Serbest elektron, yaklaşık olarak eşdeğer olan metilen grubunun iki protonu, CH protonu, NH protonu ve N çekirdekleri ile etkileştiği belirtilmiştir. Simüle edilmiş spektrumdan elde edilen aşırı ince sabitleri ve çizgi genişliği $a_{\text{CH}}^{(1)} = 1.8$, $a_{\text{CH}}^{(2)} = 1.5$, $a_{\text{CH}} = 0.3$, $a_{\text{NH}} = 0.2$, $a_{\text{N}} = 0.43$ mT ve $\Delta H = 0.3$ mT olduğunu göstermiştir. Bu radikalın g değeri 2.0044 ± 0.0005 olarak belirlenmiştir. Örneğin simüle edilmiş spektrumu Şekil 1(b)'de gösterilmiştir. Birbirine oldukça benzer simüle ve deneysel EPR spektrumları elde edilmiştir. Ayrıca radikalın oda sıcaklığında kararlılığı da incelenmiştir. Toz örnekte oluşan radikalın oda sıcaklığında dört ay boyunca kararlı olduğu tespit edilmiştir (Osmanoğlu ve ark., 2017).

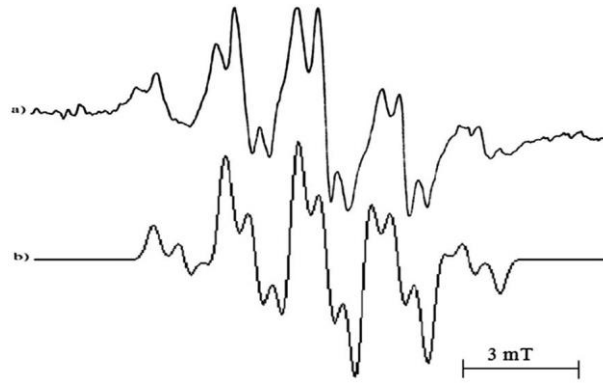


Şekil 1. (a) LAG Örneğinin EPR Spektrumu (b) Simüle Spektrum

N-Metil-L-Alanin (NMLA)

L-alanin amino asidinin bir türevi olan N-metil-L-alanin, L-alanin'in amino grubunun ($-\text{NH}_2$) metil grubu ($-\text{CH}_3$) ile yer değiştirilmesiyle oluşur. Metil grubu, molekülün biyolojik özelliklerini ve biyolojik sistemlerdeki işlevini etkileyebilir. N-metil-L-alanin, metilasyon yoluyla bazı biyolojik fonksiyonları değiştirebilir. Ancak, bu bileşiğin biyolojik etkileri hakkında daha fazla araştırma yapılması gerekmektedir. Metil gruplarının biyolojik etkileri genellikle sinir sistemi fonksiyonları, enerji metabolizması, detoksifikasyon süreçleri ve protein modifikasyonları gibi alanlarda önemli rol oynayabilir. Bu nedenle, N-Methyl-L-alanine'nin potansiyel biyolojik önemi, özellikle nörotransmisyon, hücresel iletişim ve metabolizma üzerinde daha fazla araştırma gerektirmektedir.

Kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NHCH}_3)\text{COOH}$ olan N-metil-L-alanin oda sıcaklığında 12 kGy dozunda ^{60}Co gama-ışını kaynağı ile ışınlanmıştır. Şekil 2(a)'da γ - ile ışınlanmış NMLA'nın EPR spektrumu, oda sıcaklığında 6.7 mT aralıklarla yaklaşık 1:2:1:4:8:4:6:12:6:4:8:4:1:2:1 yoğunluk dağılımına sahip beş setten oluştuğu görülmüştür. Ayrıca beş setin her birinin 1:2:1 yoğunluk dağılımına sahip olduğu ifade edilmiştir. EPR spektrumunda aşırı ince yapı yarıma sabitleri, $a^{(1)}_{\text{CH}_3} = 2.2 \text{ mT}$, $a^{(2)}_{\text{CH}_3} = 2.1 \text{ mT}$, $a^{(3)}_{\text{CH}_3} = 2.0 \text{ mT}$, $a_{\text{NH}} = 1.9 \text{ mT}$, $a^{(4)}_{\text{CH}_3} = 0.86 \text{ mT}$, and $a_{\text{N}} = 0.34 \text{ mT}$ olarak hesaplanmış ve ışınlama sonucu oluşan radikal $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{NHCH}_3\text{COOH}$ olarak yorumlanmıştır. Azot çekirdeğinin etkisi NMLA spektrumunda görülmemiştir. Çünkü aşırı ince yapı yarıma sabiti küçüktür ($a_{\text{N}} = 0.34 \text{ mT}$) ve yaklaşık olarak çizgi genişliğine eşittir ($\Delta H \sim 0.3 \text{ mT}$). Bu nedenle azot etkileşimi yalnızca çizgilerin genişlemesine neden olduğu ifade edilmiştir. Bu radikalın g değeri $g = 2.0037 \pm 0.0005$ olarak belirlenmiştir. Yoğun olarak gözlenen spektrumdaki beş çizgi metil grubunun hemen hemen manyetik olarak özdeş olan üç protonu ile aşırı ince yapı etkileşiminden kaynaklandığı tespit edilmiştir. β -protonlarının, C_α - C_β bağı etrafında hızlı dönmesi nedeniyle yaklaşık olarak eşdeğer olduğu ve aşırı ince yapı yarılmasının, α -protonları için hesaplanan değere yakın olduğu hesaplanmıştır (yaklaşık 2.5 mT). $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{NHCH}_3\text{COOH}$ radikalının oda sıcaklığında dört ay boyunca kararlı olduğu tespit edilmiştir. Verilen değerler kullanılarak spektrumun simülasyonu Şekil 2(b)'de sunulmuştur (Sütçü ve Osmanoğlu, 2014).

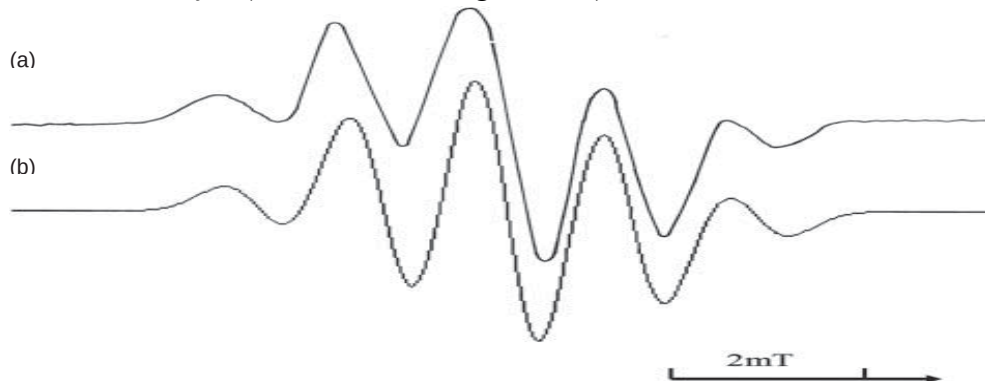


Şekil 2. (a) NMLA Toz Örneğin EPR Spektrumu (b) Simüle Spektrum

N-Metil-DL-Alanin (NMA)

N-Metil-DL-alanin, N-metil-L-alanin'in bir türevidir ve D-alanin ile L-alanin izomerlerinin karışımından oluşur. Bu bileşik, bir D ve bir L izomerini içeren karışım (DL-karışımı) olarak bulunur. N-methylation (metil grubu eklenmesi), bileşiğin biyolojik özelliklerini ve fonksiyonlarını önemli ölçüde değiştirebilmektedir. N-Metil-DL-alanin, N-metilasyon ve amino asit modifikasyonları açısından biyolojik önemi olan bir bileşiktir. Ancak, bu bileşiğin biyolojik etkileri hakkında yapılan araştırmalar sınırlıdır. Genel olarak, N-Metil-DL-alanin'nin nörolojik, enerji metabolizması, protein sentezi, detoksifikasyon ve hücre içi sinyalleme gibi birçok biyolojik işlevi etkileyebileceği öne sürülmektedir. Bu bileşiklerin metilasyon yoluyla biyolojik süreçleri nasıl değiştirdiği, özellikle nörolojik hastalıklar ve metabolizma üzerine potansiyel terapötik faydaları açısından daha fazla araştırılmalıdır.

N-Metil-DL-alanin'in kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NHCH}_3)\text{COOH}$ şeklinde olup, oda sıcaklığında 15 kGy dozunda ^{60}Co gama-ışını kaynağı ile ışınlanmıştır. Şekil 3(a)'daki EPR toz spektrumu, gama ışını ile ışılandıktan sonra N-metil-dl-alanin'in incelenmesiyle elde edilmiştir. Bu spektrum beş çizgiden oluşmakta ve yoğunluk dağılımı 1:4:6:4:1 şeklinde bir orana sahiptir. Bu spektrumda görülen $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$ radikalinin, $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NHCH}_3)\text{COOH}$ örneğindeki NHCH_3 grubunun kopmasından kaynaklandığı düşünülmektedir. Bu deneysel veriler, eşlenmemiş elektronun spininin, α -protonu ve eşdeğer metil grubu protonlarıyla etkileşime girdiğini göstermektedir. Bu beş çizgi, binom katsayılarına (1:4:6:4:1) benzer bir yoğunluk oranına sahip olup, bunlar $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$ radikaline aittir. Bu radikal oda sıcaklığında 5 gün boyunca kararlı kaldığı gözlenmiştir. $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$ radikali ile ilgili manyetik parametreler, spektrumun simülasyonu ile elde edilmiştir. Bu parametreler $a_{\text{CH}} = 1.7$ mT ve $a_{\text{CH}_3} = 1.7$ mT olarak alınabilir. Şekil 3(a) ve (b)'de gösterildiği gibi, deneysel ve simüle edilen spektrum arasında iyi bir uyum gözlemlenmiştir. Ölçülen g değeri $g = 2.0041 \pm 0.0005$, ve çizgi genişliği 0.4 mT olarak belirlenmiştir (Dicle ve Osmanoğlu, 2014).



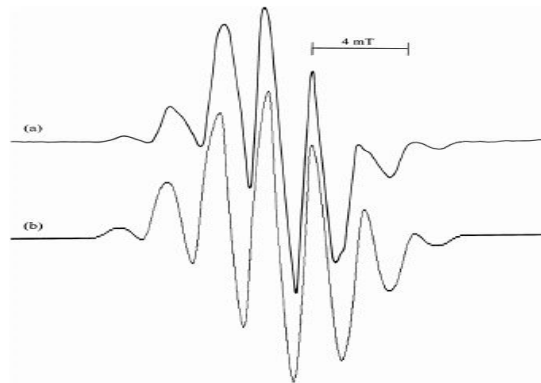
Şekil 3. (a) NMA'nın EPR Spektrumu (b) Simülasyon Spektrumu

Ala-Ala (L-alanin-L-alanin)

Ala-ala, genellikle "Ala-Ala" veya "AlaAla" olarak yazılan ve çoğunlukla "L-alanin" amino asidinin bir türü ya da kimyasal yapısının kısaltması olarak kullanılan bir ifadedir. Ancak, kimya ve biyoloji bağlamında "Ala-Ala", iki L-alanin amino asidinin bağlanmasıyla oluşan bir peptit veya dipeptit olarak düşünülebilir.

Ala-Ala (L-alanin-L-alanin) dipeptiti, amino asitlerin ve peptitlerin biyolojik işlevlerinin örneklerinden biridir. L-alanin'in metabolizmasında ve protein yapı taşlarında rolü, bu tür basit dipeptitlerin biyolojik önemini artırmaktadır. Ala-Ala, enerji üretimi, peptit ve protein sentezi, hücrel işlevlerin düzenlenmesi ve potansiyel farmasötik uygulamalar açısından önemli bir bileşik olabilir. Ancak, bu dipeptit ile ilgili daha fazla biyolojik araştırma yapılması, potansiyel faydalarını ve kullanım alanlarını netleştirebilir.

Ala-Ala'nın kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CONHCH}(\text{CH}_3)\text{COOH}$ olup, toz örnek, oda sıcaklığında 30 kGy dozunda bir ^{60}Co gama ışını kaynağı ile ışınlanmıştır. γ - ile ışınlanmış ala-ala tozu, oda sıcaklığında şekil 4(a) da gösterilen spektrumu verir. Bu spektrum incelendiğinde, 1:4:6:4:1 yoğunluk oranına sahip beş çizgiden oluştuğu görülmektedir. Eşlenmemiş elektron, α -karbon atomuna doğrudan bağlı bir proton ve serbestçe dönen metil gruplarının üç protonu ile etkileşime girer; bu protonlar manyetik olarak yaklaşık olarak özdeştir. Bu sonuçlara göre, örnekte oluşan radikal $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$ olarak belirlenmiştir. Ölçülen aşırı ince yapı sabitleri ve g faktörü değerleri sırasıyla $a_\alpha = 2.02 \text{ mT}$, $a_\beta = 2.24 \text{ mT}$ ve $g = 2.0041 \pm 0.0005$ 'dir. Çizgi genişliği 0.46 mT'dir. Verilen bu değerlerle gerçekleştirilen simülasyon, deneysel sonuçlarla uyumludur. (Şekil 4b). Örneğin, oda sıcaklığında üç aydan fazla kararlı olduğu tespit edilmiştir (Aydın, 2010).



Şekil 4. (a) Ala-Ala Toz Kristalinin EPR Spektrumu (b) Simüle Edilmiş Spektrum

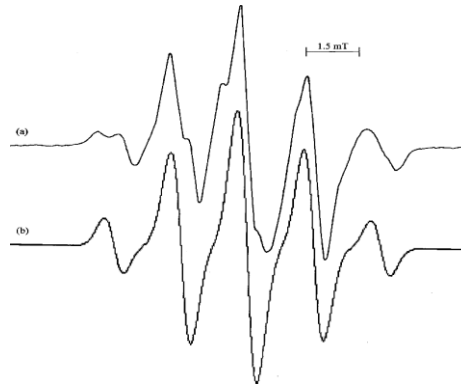
L-alanin etil ester hidroklorür (LAES)

L-Alanin etil ester hidroklorür, L-alanin amino asidinin etil ester türevidir ve hidroklorür (HCl) tuzu şeklinde bulunur. Bu bileşik, alanin amino asidinin karboksil grubunun (COOH) etil grubu ($-\text{C}_2\text{H}_5$) ile esterifikasyonu sonucu oluşur ve hidroklorür tuzu (HCl) ile birleşerek suda çözünür bir bileşik oluşturur.

L-Alanin etil ester hidroklorür, biyolojik sistemlerde çözünürlük özelliklerini artıran ve biyoyararlanımını iyileştiren bir bileşik olarak, metabolizma, nörolojik etkileşimler, bağışıklık sistemi düzenlemeleri ve farmasötik uygulamalar gibi birçok alanda önemli biyolojik etkilere sahip olabilir. Bu bileşiğin potansiyel faydalarını anlamak için daha fazla araştırma yapılması gerekmektedir.

Kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOC}_2\text{H}_5\cdot\text{HCl}$ olan, L-alanin etil ester hidroklorür (LAES) tozları oda sıcaklığında 18 kGy dozunda ^{60}Co γ -ışını kaynağı ile ışınlanmıştır. Işınlamadan sonra radikalın EPR spektrumları oda sıcaklığında 3 aydan fazla süre boyunca değişmeden kalmıştır. Şekil 5a'da oda sıcaklığında gama ile ışınlanmış LAES tozunun EPR spektrumu gösterilmektedir. Spektrumdaki beş çizgi, 1:4:6:4:1 yoğunluk oranına sahiptir. Bu spektrum, $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOC}_2\text{H}_5$

radikaline atfedilebilir. Eşleşmemiş elektron, α karbon atomuna doğrudan bağlı bir proton ve metil grubunun protonları ile etkileşime girmektedir. Ölçülen aşırı ince yapı parametre değerleri $a_{CH} = 1.85$ mT, $a_{CH_2} = 2.10$ mT, ve çizgi genişliği $\Delta H = 0.36$ mT, radikal için g değeri 2.0033 ± 0.0005 'tir. Bu aşırı ince yapı parametreleri kullanılarak simüle edilmiş spektrum Şekil 5b'de sunulmaktadır. Sonuç olarak, gama-ışınlamasının LAES'de $-COOH$ grubuna bağlı karbon atomundan bir NH_2 grubunun kopması ile serbest radikal ürettiği söylenebilir (Aydın ve ark., 2008).

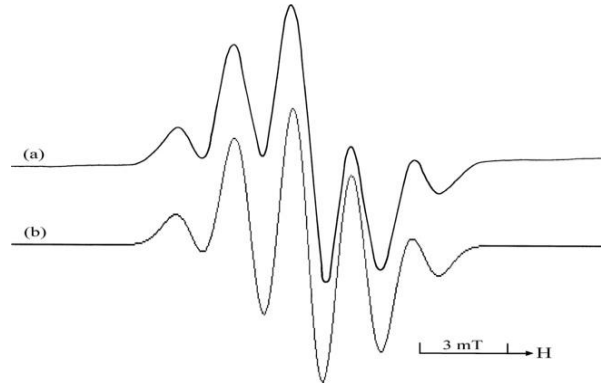


Şekil 5. (a) LAES Örneğinin EPR Spektrumu (b) Simüle Spektrum

L-alanin metil ester hidroklorür (LAME)

L-Alanin metil ester hidroklorür, L-alanin amino asidinin metil ester türevi olarak biyolojik özellikler açısından çeşitli potansiyellere sahip bir bileşiktir. Bu bileşik, kimyasal yapısındaki metil grubu ve hidroklorür tuzu ile biyolojik işlevlerde bazı önemli etkiler gösterebilir. L-Alanin metil ester hidroklorür, biyolojik sistemlerde çözünürlük özelliklerini artırarak hücrel erişimi ve biyolojik etkinliği artırabilir. Metil esteri olarak, enerji metabolizması, nörolojik etkiler, protein sentezi ve bağışıklık fonksiyonları gibi bir dizi biyolojik süreç üzerinde etkiler gösterebilir. Ayrıca, bu bileşiklerin antioksidant, antiinflamatuvar, ve terapötik uygulamalarda faydalı olabileceği öne sürülmektedir. Ancak, daha fazla araştırma yapılması gereken bir bileşiktir ve bu araştırmalar, özellikle farmasötik ve biyolojik alanlardaki potansiyel kullanımlarını belirleyecektir.

LAME'nin kimyasal formülü $CH_3CH(NH_2)COOCH_3.HCl$ dir. Toz örneğin oda sıcaklığında 2 aydan daha fazla bir süre boyunca kararlı kaldığı belirlenmiştir. Bileşik, 30 kGy'lik doz oranında gama ışınına maruz bırakılmıştır. Oda sıcaklığında gama ışını ile ışınlanmış LAME'nin EPR spektrumu, Şekil 6a'da gösterilmektedir. Bu spektrum, 1:4:6:4:1 yoğunluk dağılımına sahip beş çizgiden oluşmaktadır ve $CH_3\dot{C}HCOOCH_3$ radikaline atfedilebilir. Eşleşmemiş elektron, alfa-karbon atomuna doğrudan bağlı bir proton ve serbestçe dönen metil gruplarının üç protonuyla etkileşir, bu protonlar manyetik olarak yaklaşık olarak özdeşdir. Ölçülen aşırı ince yapı sabitleri ve g faktörü değerleri sırasıyla $a_{CH} = 1.95$ mT, $a_{CH_3} = 2.23$ mT, $g = 2.0040 \pm 0.0005$ ve çizgi genişliği (ΔH) = 0.48 mT olarak bulunmuştur. Bu aşırı ince yapı parametreleri ile simüle edilen spektrum Şekil 6 b'de sunulmuştur. Deneyisel ve simüle edilen EPR spektrumlarının birbirleriyle oldukça uyumlu olduğu bulunmuştur. Bu sonuçlara göre, $CH_3\dot{C}HCOOCH_3$ radikalinin, karboksil grubuna bağlı karbon atomundan amino grubunun kopmasıyla elde edildiği söylenebilir (Aydın ve ark., 2013).



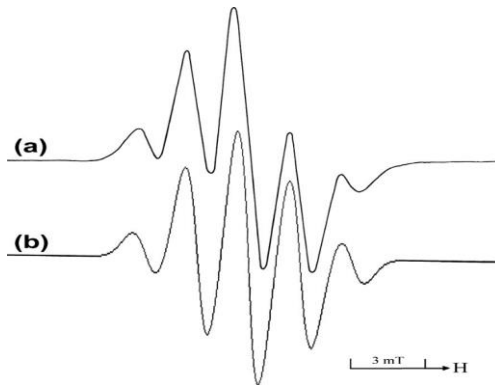
Şekil 6. (a) LAME Örneğinin EPR Spektrumu (b) Simülasyon Spektrumu

DL-Alanin etil ester hidroklorür (DLA)

DL-alanin etil ester hidroklorür, biyolojik araştırmalar ve bazı farmasötik uygulamalarda yaygın olarak tercih edilen bir bileşiktir. Alanin, vücutta önemli bir amino asit olup, DL-alanin etil ester hidroklorür de bu bileşiğin etil ester formudur. Bu ester türevi, biyolojik sistemlerde çeşitli etkiler gösterebilir. DL-alanin etil ester hidroklorür, biyolojik olarak alanin metabolizması üzerinde etkilidir ve enerji üretimi, glukoz döngüsü, protein sentezi gibi önemli metabolik süreçlerde rol oynar. Ester formu, biyoyararlanımını artırabilir, bu da onun farmasötik formülasyonlarda ve biyolojik araştırmalarda kullanılmasını daha verimli hale getirebilir. Ayrıca, sporcular, glukoz metabolizması ve bağışıklık sisteminin desteklenmesi gibi alanlarda potansiyel kullanımları vardır.

Kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOC}_2\text{H}_5 \cdot \text{HCl}$ olan Toz örnek, oda sıcaklığında 30 kGy dozunda bir ^{60}Co gama ışını kaynağı ile ışınlanmıştır. Işınlamadan sonra, örneğin EPR spektrumları, oda sıcaklığında iki aydan fazla bir süre değişmeden kaldığı tespit edilmiştir.

Şekil 7 a, gama ışını ile ışınlanmış DLA tozunun oda sıcaklığında kaydedilen EPR spektrumunu göstermektedir. Spektrum 1:4:6:4:1 yoğunluk dağılımına sahip bir beşli yapıyı göstermektedir. Bu, manyetik olarak eşdeğer dört protonla etkileşen bir serbest elektronun varlığını gösterir: Bunlardan üçü serbestçe dönen bir metil grubunun (CH_3) protonlarına, biri ise α -protonuna aittir. Bu spektrum, $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOC}_2\text{H}_5$ radikali ile ilişkilendirilmektedir. Şekil 7b'de, $a_\alpha = 1.98 \text{ mT}$ ve $a_\beta = 2.20 \text{ mT}$ aşırı ince yapı bağlama sabitleri kullanılarak yapılan bir simülasyon gösterilmiştir. Radikalin g-değeri, $g = 2.0038 \pm 0.0005$ olarak belirlenmiştir. Bu sonuçlara göre, $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOC}_2\text{H}_5$ radikalinin, COOC_2H_5 grubuna bağlı olan karbon atomundan NH_2 grubunun kopmasıyla elde edildiğini söyleyebiliriz (Başkan ve Aydın, 2013).



Şekil 7. (a) DLA Toz Örneğinin EPR Spektrumu (b) Simüle Spektrum

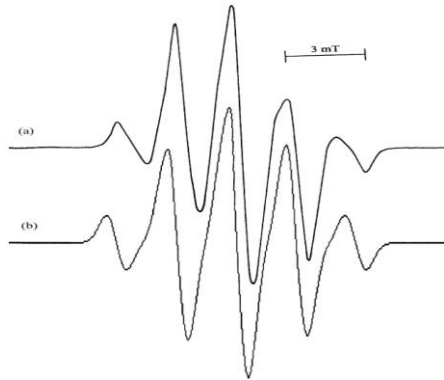
L-alaninamid hidroklorür (LAHCl)

Bu bileşik, L-alanin amino asidinin amid türevidir ve hidroklorür tuzu (HCl) ile reaksiyona girer. Yani, L-alaninamid hidroklorür'ün yapısında, L-alanin'in amid grubu ($-\text{CONH}_2$) ve hidroklorür (Cl^-) iyonu bulunur.

L-alaninamid hidroklorür, L-alanin türevi olup, özellikle metabolizma, protein yapıları ve sinir sistemi işlevleriyle ilişkili biyolojik etkilere sahip olabilir. Amid grubunun, hücresel düzeyde önemli biyolojik etkileşimleri modüle etme potansiyeli vardır. Bununla birlikte, bu bileşiğin spesifik biyolojik özellikleri ve farmasötik kullanımı hakkında daha fazla araştırma yapılması gereklidir.

LAHCl Toz örneğinin kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{CONH}_2 \cdot \text{HCl}$ şeklinde olup, ^{60}Co gama-ışın kaynağından 21 kGy doz oranında ışınladı. Radikalin EPR spektrumu, oda sıcaklığında üç aydan fazla bir süre değişmeden kaldığı gözlemlendi.

Gama-ışınlarına maruz bırakılmış LAHCl tozunun tipik bir EPR spektrumu Şekil 8a' da gösterilmiştir. Spektrumda 1:4:6:4:1 yoğunluk dağılımına sahip beşli bir yapı vardır. Eşleşmemiş elektron, bir α -protonu ve üç β -protonu ile etkileşir, bunlar hemen hemen manyetik olarak eşdeğerdir. Bu nedenle paramanyetik merkez $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCONH}_2$ radikali olarak belirlenmiştir. Radikal, CONH_2 grubuna bağlı karbon atomundan NH_2 grubunun kopması sonucu oluşmuş olabilir. LAHCl spektrumunun simülasyonu, Şekil 8b' de gösterilmektedir ve burada aşırı ince yapı etkileşim sabitleri $a_\alpha = 1,94$ mT, $a_\beta = 2,26$ mT ve çizgi genişliği 0.42 mT kullanılmıştır. g sabiti değeri $g = 2,0042 \pm 0,0005$ olarak ölçülmüştür (Başkan ve Aydın, 2011).



Şekil 8. (a) LAHCl Örneğinin EPR Spektrumu (b) Simüle Edilmiş Spektrum

N-asetil-L-alanin (ALA)

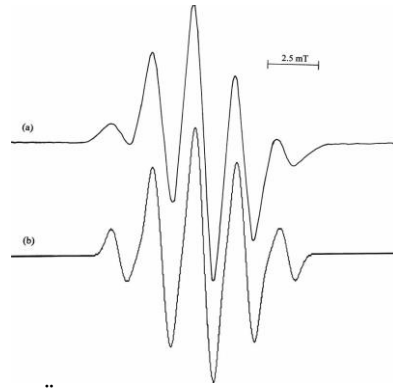
N-asetil-L-alanin, asetil grubu taşıyan bir L-alanin türevidir ve çeşitli biyolojik etkilerle ilişkili olabilir. Bu bileşik, enerji metabolizması, nörolojik sağlık, protein yapısı ve hücresel işlevler üzerinde etkili olabilir. Asetilasyon, bazı biyolojik aktiviteleri modüle ederek tedavi edici özellikler sunabilir. Ancak, bu bileşiğin biyolojik etkileri üzerine daha fazla araştırma yapılması gerekmektedir.

Toz örneğin kimyasal formülü $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NHCOCH}_3)\text{COOH}$ olup, ^{60}Co γ -ışını kaynağı ile oda sıcaklığında 36 kGy radyasyon dozuyla ışınlanmıştır.

γ -ışınına maruz bırakılmış örnek, EPR spektrumları kaydedilmeden önce oda sıcaklığında saklanmış ve ölçümlerden sonra oluşan türlerin stabilitesini takip etmek için üç ay boyunca spektrumlar kontrol edilmiştir.

Oda sıcaklığında γ -ışınına maruz bırakılmış ALA tozunun EPR spektrumu Şekil 9(a)'da gösterilmektedir. Spektrum, yaklaşık 1:4:6:4:1 yoğunluk oranına sahiptir ve bu, dört yaklaşık eşdeğer protonun, α -protonunun ve serbest dönen metil grubunun üç protonunun etkileşimiyle açıklanabilir. Bu spektrumun hasar merkezi, $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$ radikaline atfedilebilir. Eşleşmemiş elektron, doğrudan α -

karbon atomuna bağlı bir proton ve metil gruplarının üç protonu ile etkileşime girer. ALA spektrumunun, $a_{CH} = 1.90$ mT, $a_{CH_3} = 2.25$ mT ve çizgi genişliği 0.45 mT dır. Aşırı ince yapı etkileşim sabitleri kullanılarak yapılan simülasyonu Şekil 9(b)'de gösterilmiştir. Radikal için g-değeri 2.0032 ± 0.0005 olarak bulunmuştur. Sonuç olarak, gama-ışını ile ALA'da oluşan radikalın, $-COOH$ grubuna bağlı karbon atomundan $NHCOCH_3$ grubunun kopması sonucu oluştuğu söylenebilir (Başkan ve ark., 2010).



Şekil 9. (a) ALA Örneğinin EPR Spektrumu (b) Simüle Spektrum

L- α -alanin etil ester (LAEE)

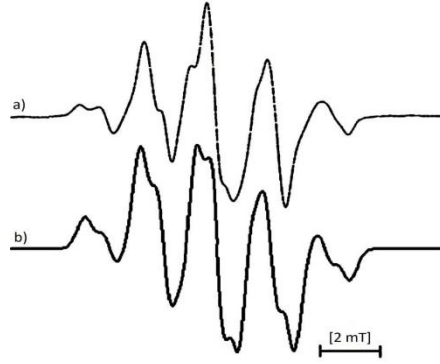
L- α -alanin Etil Ester'in kimyasal yapısı, L-alanin amino asidinin etil ester türevidir. Bu bileşik, L-alanin amino asidinin karboksil grubuna ($-COOH$) bağlı etil grubu (C_2H_5) eklenmesiyle oluşur.

L- α -alanin etil ester, biyolojik olarak, L-alanin'in metabolizma, enerji üretimi ve potansiyel olarak nörolojik işlevler üzerindeki etkilerini modüle edebilir. Ester formunun çözünürlük ve biyoyararlanım üzerindeki etkisi, vücutta daha hızlı emilim ve etkinlik sağlayabilir. Bununla birlikte, bu bileşiğin klinik ve farmasötik kullanımları hakkında daha fazla araştırma yapılması gerekmektedir.

Spektrumların oda sıcaklığında 2 aydan daha fazla kararlı kaldığı görülmüştür. Radikallerin (paramanyetik merkez) manyetik parametreleri ve elektronik yapıları simülasyon metoduyla doğrulanmıştır.

Kimyasal formülü $CH_3CH(NH_2)COOCH_2CH_3$ olan Örnek, yaklaşık 12 saat boyunca oda sıcaklığında ^{60}Co kaynağı ile gama ışınına maruz bırakılmıştır.

LAEE spektrumunun yoğunluk dağılımının spektrumunun ortasında yaklaşık 1:1:4:4:6:6:4:4:1:1 oranı görülmektedir (Şekil 10a). γ -ışınına maruz bırakılmış LAEE spektrumu incelendiğinde, 12 mT'lik bir beşli çizgi olduğu önerilmektedir. Beşli çizginin her biri, 1:1 oranında ikiye bölünmüştür. Şekil 10a'daki 1:1:4:4:6:6:4:4:1:1 spektrumu, $CH_3\dot{C}HCOCH_2CH_3$ radikale atfedilebilir. Bu radikalın, LAEE molekülünden NH_2 'nin kopmasından kaynaklandığı söylenebilir. Spektrum, $a^1_{CH_2}$ ve $a^2_{CH_2}$ 'nin aşırı ince yapı sabitlerinin birbirine yakın olması nedeniyle daha az çözülebilmektedir. Serbest elektron, α -protonu ve üç adet manyetik olarak özdeş β -protonu ile etkileşir. Manyetik parametreler $a^1_{CH} = a^1_{CH_3} = a^2_{CH_3} = a^3_{CH_3} = 2.40$ mT, $a^1_{CH_2} = 1.0$ mT ve $a^2_{CH_2} = 0.63$ mT olarak ölçülmüş ve çizgi genişliği 0.45 mT olarak belirlenmiştir. g faktörü, $g = 2.0039 \pm 0.0005$ olarak değerlendirilmiştir. Simüle edilmiş spektrum Şekil 10b'de verilmiştir. Şekil 10a'daki spektrum, Şekil 10b ile uyumlu görünmektedir (Osmanoğlu, 2020).



Şekil 10. (a) LAEE Örneğinin EPR Spektrumu (b) Simülasyon Spektrumu

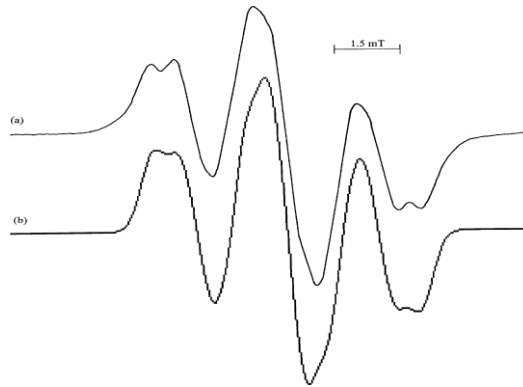
Alanil-L-glutamin (ALG)

Alanil-L-glutamin'in biyolojik önemi, hem L-alanin hem de L-glutamin amino asitlerinin sağladığı faydalardan türetilen bir dizi olumlu etkiye dayanmaktadır. Bağışıklık sistemi desteği, kas onarımı, nörolojik sağlık, sindirim ve enerji metabolizması gibi birçok önemli işlevi vardır. Bu özellikleri nedeniyle, alanil-glutamin, sporcular, bağışıklık sistemi desteği ihtiyacı olanlar ve çeşitli sağlık koşullarıyla mücadele eden bireyler için potansiyel bir biyolojik destek sağlayabilir.

Sonuç olarak, alanil L-glutamin, enerji üretimi, hücre sağlığı, bağışıklık fonksiyonları ve sinir iletimi gibi birçok biyolojik süreçte kritik bir rol oynayan önemli bir bileşiktir.

Tozlar, ^{60}Co γ -ışını kaynağı ile oda sıcaklığında 18 kGy dozunda ışınlamaya maruz bırakıldı. Işılandıktan sonra radikalın EPR spektrumları, 3 aydan fazla bir süre oda sıcaklığında değişmeden kaldı. ALG örneğinin kimyasal yapısı $\text{H}_2\text{NCH}(\text{CH}_3)\text{CONHCH}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CONH}_2)\text{COOH}$ şeklindedir.

Oda sıcaklığındaki gama-ışını ile ışınlanmış ALG tozunun EPR spektrumu, şekil 11a'da gösterilmektedir. Bu spektrum için hasar merkezi, $\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{NHCOOH}$ olarak belirlenmiştir. Eşleşmemiş elektron, iki metilen protonu, bir NH protonu ve ^{14}N çekirdeği ile etkileşime girer. ALG spektrumunun simülasyonu, şekil 11b'de gösterilmektedir ve bu simülasyon, $a_{\text{CH}_2} = 2.10 \text{ mT}$, $a_{\text{NH}} = 0.68 \text{ mT}$ ve $a_{\text{N}} = 0.43 \text{ mT}$ aşırı ince yapı bağlanma sabitlerini kullanarak yapılmıştır. Örneğin g değeri $g = 2.0028 \pm 0.0005$ 'tir. Deneysel ve simüle edilmiş EPR spektrumları arasındaki iyi bir uyum vardır. Sonuç olarak, gama-ışınlanması ALG'de bir CH grubundan bir hidrojen atomunun kopması yoluyla serbest radikal ürettiği söylenebilir. Çizgi genişliği $\Delta H = 0.38 \text{ mT}$ olarak belirlenmiştir Aydın ve ark., 2010).



Şekil 11. (a)ALG Örneğinin EPR Spektrumu (b) Simüle Spektrum

Tablo.1 Bazı Alanin Radikallerinin EPR Parametreleri

Madde	Radikal	a Değerleri (mT)	g Değerleri (± 0.0005)
L-Alanil Glisin (LAG)	$\dot{\text{C}}\text{H}_2\text{CHNH}$	$a^{(1)\text{CH}}=1.8, a^{(2)\text{CH}}=1.5,$ $a_{\text{CH}}=0.3, a_{\text{NH}}=0.2,$ $a_{\text{N}}=0.43$	2.0044
N-Metil-L-Alanin (NMLA)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{NHCH}_3\text{COOH}$	$a^{(1)}_{\text{CH}_3}=2.2, a^{(2)}_{\text{CH}_3}=2.1,$ $a^{(3)}_{\text{CH}_3}=2.0, a_{\text{NH}}=1.9,$ $a^{(4)}_{\text{CH}_3}=0.86, a_{\text{N}}=0.34$	2.0037
N-Metil-DL-Alanin (NMA)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$	$a_{\text{CH}}=1.7, a_{\text{CH}_3}=1.7$	2.0041
Ala-Ala (L-Alanin-L-Alanin)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$	$a_{\alpha}=2.02, a_{\beta}=2.24$	2.0041
L-Alanin Etil Ester Hidroklorür (LAES)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOC}_2\text{H}_5$	$a_{\text{CH}}=1.85, a_{\text{CH}_2}=2.10$	2.0033
L-Alanin Metil Ester Hidroklorür (LAME)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOCH}_3$	$a_{\text{CH}}=1.95, a_{\text{CH}_3}=2.23$	2.0040
DL-Alanin Etil Ester Hidroklorür (DLA)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOC}_2\text{H}_5$	$a_{\alpha}=1.98, a_{\beta}=2.20$	2.0038
L-Alaninamid Hidroklorür (LAHCl)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCONH}_2$	$a_{\alpha}=1.94, a_{\beta}=2.26$	2.0042
N-Asetil-L-alanin (ALA)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$	$a_{\text{CH}}=1.90, a_{\text{CH}_3}=2.25$	2.0032
L- α -Alanin Etil Ester (LAEE)	$\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOCH}_2\text{CH}_3$	$a^1_{\text{CH}} = a^1_{\text{CH}_3} = a^2_{\text{CH}_3} =$ $a^3_{\text{CH}_3} = 2.40, a^1_{\text{CH}_2} = 1.0,$ $a^2_{\text{CH}_2} = 0.63$	2.0039
Alanil-L-Glutamin (ALG)	$\text{CH}_2\dot{\text{C}}\text{NHCOOH}$	$a_{\text{CH}_2}=2.10, a_{\text{NH}}=0.68,$ $a_{\text{N}}=0.43$	2.0028

Tablo 1. de görüleceği üzere, alanin içeren maddelerin g değerleri birbirine oldukça yakındır ve 2.0028 ile 2.0044 arasında değişmektedir. Bu durum, gama ışınlamasının bu maddelerde benzer serbest radikaller oluşturduğunu ve bu radikallerin elektronik yapılarının benzer olduğunu göstermektedir.

g değeri, bir serbest radikalın manyetik momentinin açılal momentumuna oranını ifade eden bir parametredir ve radikalın elektronik yapısı hakkında bilgi verir. Alanin içeren maddelerin gama ışınlaması sonucu oluşan serbest radikallerin g değerlerinin birbirine yakın olması, bu maddelerin gama ışınlarına karşı benzer hassasiyet gösterdiğini ve benzer mekanizmalarla bozunduğunu düşündürmektedir. g değerindeki küçük farklılıklar, radikale bağlı olan farklı fonksiyonel gruplardan dolayıdır.

Bazı örneklerde benzer radikaller oluşmaktadır: N-metil-dl-alanin (NMA), Ala-ala (L-alanin-L-alanin), N-asetil-L-alanin (ALA): Bu üç örnekte de $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOH}$ radikali oluşmaktadır. Bu radikalın oluşumu, ilgili moleküllerde $-\text{COOH}$ grubuna bağlı atom gruplarının kopmasıyla açıklanmaktadır.

L-alanin etil ester hidroklorür (LAES), DL-alanin etil ester hidroklorür (DLA): Bu iki örnekte de $\text{CH}_3\dot{\text{C}}\text{HCOOC}_2\text{H}_5$ radikali oluşmaktadır. Bu radikal, $-\text{COOC}_2\text{H}_5$ grubuna bağlı karbon atomundan NH_2 grubunun kopması sonucu oluşmaktadır.

Bu örneklerde benzer radikallerin oluşması, ilgili moleküllerin yapısal benzerliklerine ve gama ışınlamasının moleküllerde benzer bağ kırılmalarına yol açmasına bağlanabilir.

Bununla birlikte, her ne kadar radikal yapısı aynı olsa da, EPR spektrumlarında gözlenen a değerleri ve g değerlerinde küçük farklılıklar görülebilir. Bu farklılıklar, radikalleri çevreleyen moleküler yapıdaki ince farklılıklardan kaynaklanmaktadır. Alanin türevlerinde gama ışınlaması

sonucu oluşan radikallerin büyük çoğunluğu karbon merkezli radikallerdir. Bu radikallerin oluşumu, yoğunlukla bir hidrojen atomunun veya amino grubunun alfa karbon atomundan ayrılmasıyla gerçekleşir. Tüm radikallerde, alanin molekülünden bir atomun veya bir grubun ayrılmasıyla (hidrojen, amino grubu, asetil grubu gibi) oluşan radikal türleri görülmektedir.

SONUÇ

Sonuç olarak, gama ışınlaması sonucu oluşan radikallerin farklı olması, her maddenin kendine özgü bir şekilde ışınlamaya tepki verdiğini gösterir. Bu tepkinin nasıl olacağı ise maddenin kimyasal yapısına ve atomların bağlanma özelliklerine bağlıdır.

EPR spektrumlarındaki çizgilerin yoğunluk dağılımı, eşleşmemiş elektronun komşu atomların çekirdek spinleri ile olan etkileşimini (aşırı ince yapı etkileşimi) yansıtır. Yoğunluk oranları, etkileşen proton sayısı ve bu protonların manyetik olarak eşdeğer olup olmadığı hakkında bilgi verir. Örneğin, 1:4:6:4:1 yoğunluk oranı, eşleşmemiş elektronun dört eşdeğer protonla etkileştiğini gösterir. Bazı spektrumlarda, çizgi genişlemesi veya aşırı ince yapı etkileşim sabitlerinin birbirine yakın olması nedeniyle bazı çizgiler gözlemlenemeyebilir veya çözülemeyebilir (LAG ve LAEE örnekleri).

NMA, ala-ala, LAME, LAES, DLA, LAHCl, ALA örneklerinde 1:4:6:4:1 yoğunluk oranına sahip karakteristik beş çizgili bir spektruma gözlemlenir. Bunun nedeni serbest elektron(eşleşmemiş elektron) alfa karbonuna bağlı proton ve metil grubunun protonları ile etkileşime girmesidir. Bu protonlar yaklaşık manyetik olarak özdeşler.

NMLA örneğinde spektrum, yaklaşık 1:2:1:4:8:4:6:12:6:4:8:4:1:2:1 yoğunluk dağılımına sahip beş setten oluşur. Beş setin her biri 1:2:1 yoğunluk dağılımına sahiptir.

L-alanil glisin (LAG) örneğinde Spektrum, azotun aşırı ince yapı etkileşim sabiti spektrumun çizgi genişliğine çok yakın olduğu için yaklaşık bir üçlü (triplet) yapı gösterir.

L- α -alanin etil ester (LAEE) tozunda, Spektrumunun ortasında yaklaşık 1:1:4:4:6:6:4:4:1:1 yoğunluk oranı görülmektedir. Beşli çizginin her biri, 1:1 oranında ikiye bölünmüştür.

LAG ve NMLA toz örneklerinde ^{14}N çekirdeği ile olan etkileşim spektrumunda gözlenmemektedir. Bunun nedeni ^{14}N çekirdeğinin aşırı ince yapı sabiti (a değeri) spektrumun çizgi genişliğine yakın değerde olmasından dolayı, çizgi genişlemesine yol açıyor.

EPR (Elektron Paramanyetik Rezonans) spektrumlarındaki çizgi yoğunluklarının (line intensity) eşit veya farklı olması, radikal yapısı, manyetik etkileşimler ve moleküler dinamik gibi birçok faktöre bağlıdır. Çizgi yoğunluklarının yorumlanması, spektrumdaki radikalın karakterizasyonu ve moleküler ortamı hakkında önemli bilgiler sağlar.

Aşırı İnce Yapı Sabiti (a Sabiti)

Aşırı İnce Yapı Sabiti bölünmeleri, radikalın molekül içindeki yapısı hakkında detaylı bilgi verir. Her çekirdek türü ve konumu, kendine özgü bir Aşırı İnce Yapı Sabiti (a değeri) oluşturur.

Örneklerde gama ışınlaması sonrası oluşan serbest radikallerin α -protonları (a_α) ile olan etkileşimi genel olarak 1.8 - 2.4 mT aralığında değişmektedir. β -protonlar (a_β) için aşırı ince yapı sabitleri 2.1 - 2.26 mT aralığında olup, moleküler yapıya göre farklılık göstermektedir. Azot içeren bileşiklerde azot çekirdeği ile olan etkileşim (a_N) bazı örneklerde belirgin ölçülebilirken, bazı bileşiklerde ihmal edilebilir seviyededir. Metil ve etil grubu içeren bileşiklerde proton etkileşimleri metil gruplarının serbest rotasyonuna ve radikal merkezine olan uzaklığına bağlı olarak değişmektedir. Bazı bileşiklerde benzer radikallerin olduğu, ancak fonksiyonel grupların radikal stabilitesi ve elektron dağılımı üzerinde etkili olduğu belirlenmiştir. Bu sonuçlar, alanin türevlerinin gama ışınlamasına verdiği tepkilerin belirli bir mekanizmaya dayandığını ve fonksiyonel grupların radikal yapısını doğrudan etkilediğini göstermektedir.

Genel sonuçlar:

Gama ışınlanması alanin türevlerinde belirli bir radikal oluşum mekanizmasıyla ilerlemektedir. Fonksiyonel gruplar radikal stabilitesini ve EPR parametrelerini doğrudan etkilemektedir. Elde edilen veriler, alanin türevlerinin gama ışınlamasına karşı gösterdiği tepkilerin hem biyomedikal hem de farmasötik alanlarda değerlendirilmesine yardımcı olabilir. Radikallerin uzun süre stabil kalması, gama ışınlanması ile sterilizasyon veya dozimetri uygulamalarında bu bileşiklerin kullanılabilirliğini destekleyebilir.

Çıkar Çatışması

Makale yazarları aralarında herhangi bir çıkar çatışması olmadığını beyan ederler.

KAYNAKLAR

- Aydın, M. (2010). Study of the structure of free radicals in gamma: irradiated amino acid derivatives. *Brazilian Journal of Physics*, 40, 429-431.
- Aydın, M., Halim Başkan, M., Yakar, S., Ulak, F. Ş., Aydinol, M., Aydinol, B., & Büyüm, M. (2008). EPR studies of gamma-irradiated L-alanine ethyl ester hydrochloride, L-arginine and alanyl-L-glutamine. *Radiation Effects & Defects in Solids*, 163(1), 41-46.
- Aydın, M., Şimşek, R., Gündüz, M. G., Şafak, C., & Osmanoğlu, Y. E. (2013). ESR study of some gamma irradiated amino acids and condensed 1, 4-dihydropyridines. *Journal of Molecular Structure*, 1035, 378-382.
- Başkan, M. H., & Aydın, M. (2013). Electron paramagnetic resonance studies of gamma-irradiated DL-alanine ethyl ester hydrochloride, L-theanine and L-glutamic acid dimethyl ester hydrochloride. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 112, 280-282.
- Başkan, M. H., Aydın, M., Osmanoğlu, Ş., & Topkaya, R. (2010). Electron paramagnetic resonance characterization of gamma irradiation damage centers in powder of L-(+)-tartaric acid, N-acetyl-L-alanine and 1-methyl-L-histidine. *Radiation Effects & Defects in Solids: Incorporating Plasma Science & Plasma Technology*, 165(12), 938-943.
- Dicle, I. Y., & Osmanoğlu, Ş. (2014). The effect of gamma radiation of amino acid derivatives in the solid state: an EPR study. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 169(12), 989-993.
- McKelvey, R. D. (1987). Huckel MO theory and electron spin resonance in the spectroscopy course. *Journal of Chemical Education*, 64(6), 497.
- Morton, J. R. (1964). Electron spin resonance spectra of oriented radicals. *Chemical Reviews*, 64(4), 453-471.
- Osmanoğlu, Ş., Aydın, M., Osmanoğlu, Y. E., Dicle, I. Y., & Başkan, M. H. (2011). Structure and behaviour of the free radicals generated in gamma irradiated amino acid and iminodiacetic acid derivatives. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 78(5), 1611-1614.
- Osmanoğlu, Y. E. (2020). Simulation Study of Paramagnetic Centers Induced in Glycine Tertbutyl Ester Hydrochloride and L- α -alanine Ethyl Ester in Solid State. *El-Cezerî Journal of Science and Engineering*, 7(1), 262-266.
- Osmanoğlu, Y. E., Sütçü, K., & Osmanoğlu, Ş. (2017). Radiation effect studies on some glycine derivatives in solid state. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 172(7-8), 621-628.
- Sütçü, K. (2019). Gama ile Işınlanmış Etosüksimid Numunesinin Radyasyon Duyarlılığının Elektron Paramanyetik Rezonans Spektroskopisi Yöntemiyle İncelenmesi. *Journal of the Institute of Science and Technology*, 9(2), 800-810.

- Sütçü, K., & Aydın, M. (2024). Gamma irradiation effects on diphenhydramine hydrochloride: an EPR study. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 1-10.
- Sütçü, K., & Osmanoğlu, Y. E. (2017). EPR study of gamma-irradiated N-methyl-L-alanine, DL-2-methyl glutamic acid hemihydrate and Di-leucine hydrochloride in solid state. *Journal of Molecular Structure*, 1149, 593-595.
- Sütçü, K., & Osmanoğlu, Y. E. (2023). Gama ile Işınlanmış Klorpropamid ve Prokainamid Hidroklorür İlaç Hammaddelerinde Oluşan Serbest Radikallerin EPR Spektroskopisi ile Tanımlanması. *Journal of the Institute of Science & Technology/Fen Bilimleri Estitüsü Dergisi*, 13(4).