

Bazı İminodiasetik Asit ve Türevlerinin Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) Parametrelerinin Karşılaştırılması

Comparison of the Electron Paramagnetic Resonance (EPR) Parameters of Some Iminodiacetic Acid and Their Derivatives

Mehmet Halim BAŞKAN¹

1) Dicle Üniversitesi, Ziya Gökalp Eğitim Fakültesi, Fizik Bölümü, Diyarbakır, Türkiye

ORCID: 0000-0001-9288-4947, hbaskan@dicle.edu.tr

Geliş Tarihi: 14 Nis 2025 - **Kabul Tarihi:** 2 May 2025

DOI: 10.55205/joctensa.3120241675833

ATIF: Başkan, M. H., (2025). Bazı İminodiasetik Asit ve Türevlerinin Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) Parametrelerinin Karşılaştırılması. Cihannüma Teknoloji Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi, 3 (1), 33-53.

Öz

Bu çalışma, gama ışınları ile ışınlanmış bazı iminodiasetik asit ve türevlerinin Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektrumlarını ve EPR parametrelerini karşılaştırmalı olarak incelemiştir. Araştırmada N-(2-Karboksietil) iminodiasetik asit, iminodiasetik asit hidroklorür, N-(2-Hidroksietil) iminodiasetik asit, iminodiasetik asit (Toz), iminodiasetik asit(Tek Kristal), metiliminodiasetik asit, iminodiasetik asit Hidrobromür (Toz), iminodiasetik asit Hidrobromür (Tek Kristal) örnekleri incelenmiştir. Ayrıca bu örneklerin kimyasal ve biyolojik özellikleri kapsamlı bir şekilde ele alınmıştır. Her bir bileşiğin gama ışınları sonrası elde edilen EPR spektrumları analiz edilerek g-faktörleri ve aşırı ince yapı sabitleri belirlenmiş, oluşan serbest radikallerin yapıları modellenmiştir. Deneysel veriler ile simülasyon sonuçları karşılaştırılmış ve yüksek düzeyde uyum gözlemlenmiştir. Toz örneklerde izotropik ortalamalarla sınırlı spektrumlar elde edilirken, tek kristal örneklerde yönlenmeye bağlı anizotropik özellikler detaylı olarak ortaya konmuştur. Elde edilen g-faktörleri 2.0028–2.0031 aralığında olup karbon merkezli π -radikallerle uyumludur. Aşırı ince yapı sabitleri (a), eşleşmemiş elektronun α -proton, metilen protonları, NH grubu ve ^{14}N çekirdeği ile olan etkileşimlerini yansıtarak radikal lokalizasyonu hakkında bilgi vermiştir. Ayrıca, kristal yapının radikal stabilitesi ve spektral çözünürlük üzerinde belirgin etkisi olduğu görülmüştür. Bu çalışma, iminodiasetik asit ve türevlerinin ışınlama sonrası serbest radikal davranışlarını anlamada EPR tekniğinin güçlü bir araç olduğunu göstermektedir. Elde edilen bulgular, bu bileşiklerin radyasyon stabilitesi, yapısal karakterizasyonu ve olası biyomedikal uygulamaları açısından önemli bilimsel katkılar sunmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Elektron paramanyetik rezonans, serbest radikal, iminodiasetik asit türevleri.

*Sorumlu Yazar: hbaskan@dicle.edu.tr

Abstract

This study presents a comparative investigation of the Electron Paramagnetic Resonance (EPR) spectra and EPR parameters of several iminodiacetic acid derivatives irradiated with gamma rays. The compounds examined include N-(2-carboxyethyl) iminodiacetic acid, iminodiacetic acid hydrochloride, N-(2-hydroxyethyl) iminodiacetic acid, iminodiacetic acid (powder form), iminodiacetic acid (single crystal), methyliminodiacetic acid, iminodiacetic acid hydrobromide (powder), and iminodiacetic acid hydrobromide (single crystal). Additionally, the chemical and biological properties of these compounds were discussed comprehensively. EPR spectra obtained after gamma irradiation were analyzed for each compound to determine their g-factors and hyperfine coupling constants. The resulting radical structures were modeled, and the experimental data were compared with simulation results, showing a high degree of consistency. While powder samples exhibited isotropic spectral characteristics, the single-crystal samples revealed direction-dependent anisotropic features in detail. The measured g-factors ranged from 2.0028 to 2.0031, consistent with carbon-centered π -radicals. The hyperfine coupling constants (a) reflected the interactions of the unpaired electron with α -protons, methylene protons, the NH group, and the ^{14}N nucleus, providing insight into radical localization. Furthermore, the crystal structure was shown to significantly influence radical stability and spectral resolution. This study demonstrates that the EPR technique is a powerful tool for understanding the behavior of iminodiacetic acid and its derivatives under gamma irradiation. The findings offer valuable scientific contributions in terms of radiation stability, structural characterization, and potential biomedical applications of these compounds.

Keywords: Elektron paramagnetic resonance, free radical, iminodiacetic acid derivatives.

GİRİŞ

Elektron paramanyetik rezonans (EPR) spektroskopisi, serbest radikallerin tespiti için oldukça hassas bir yöntemdir. EPR tekniği, ilaçlar, amino asitler ve iminodiasetik asit türevleri de dahil olmak üzere birçok maddede ışınlama sonucu oluşan hasar merkezlerinin tanımlanmasında yaygın olarak kullanılmaktadır (Işıkçı ve Osmanoğlu, 2020; Osmanoğlu ve Sütçü, 2023; Osmanoğlu ve Sütçü, 2024; Sütçü ve Osmanoğlu, 2023; Sütçü 2024).

Amino asitler, proteinlerin yapı taşlarıdır ve biyolojik sistemlerde temel roller oynarlar. İminodiasetik Asit (IDA), formülü $\text{HN}(\text{CH}_2\text{COOH})_2$ olan bir organik bileşiktir. Yapısında Merkezi bir azot atomuna bağlı iki asetat (CH_2COOH) grubu bulunur. Aynı zamanda yapısında iki adet karboksil ($-\text{COOH}$) grubu bulunduğu bir dikarboksilik asittir. Ancak, klasik dikarboksilik asitlerden farklı olarak bir imin ($-\text{NH}-$) grubu içerir, bu da onu amino asit türevleri ve şelatlayıcı ajanlar arasında özel bir yere koyar. Bu özellikleri sayesinde zayıf bir asittir.

IDA yapısal olarak bir amino asit türevidir, ancak klasik protein amino asitlerinden farklıdır. IDA türevleri, amino asitlerin saflaştırılmasında, ilaç sanayisinde ve şelatlama ajanı olarak önemli rol oynar. Ayrıca İminodiasetik asit, kimya ve biyoteknoloji dünyasında çok yönlü

kullanımı olan önemli bir bileşiktir. Metal şelatlayıcı özelliği sayesinde temizlik ürünlerinden ilaçlara, tarımdan moleküler biyolojiye kadar geniş bir yelpazede değerlidir.

Çalışmanın temel amacı, gama ışınları ile ışınlanmış iminodiasetik asit ve bazı türevlerinde oluşan serbest radikal türlerini Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektroskopisi ile tanımlamak ve karşılaştırmaktır. Bu tür bileşiklerin ileri teknoloji uygulamalarında (ilaç taşıyıcı sistemler, radyasyon dedektörleri, biyosensörler vb.) kullanımı için önemli bir bilimsel zemin oluşturacaktır.

MATERYAL VE YÖNTEM

Daha önce çalışılmış toz ve tek kristal örnekler ^{60}Co γ (gama)-ışını kaynağı ile oda sıcaklığında çeşitli doz oranlarında ışınlanmışlardır. Işınlanmamış örneklerde EPR sinyali gözlenmemiştir. Işınlamadan sonra örneklerin spektrumları kaydedilmiştir. Bu spektrumların yorumlarından oluşan radikaller tespit edilmiştir. g faktörü (spektroskopik yarıлма faktörü) dipenhylicrylhydrazyl (DPPH) örneği ($g = 2.0036$) ile karşılaştırılarak hesaplanmıştır. Spektrumlar simülasyon programı kullanılarak simüle edilmişlerdir (McKelvey, 1987). Toz ve tek kristal örneklerde oluşan radikallerin kararlı olduğu tespit edilmiştir.

BULGULAR VE TARTIŞMA

N-(2-Karboksietil) İminodiasetik Asit (NCIDA)

Kimyasal Formül: $\text{C}_6\text{H}_{11}\text{NO}_6$

İminodiasetik Asit türevlerinden biridir. Üç adet karboksil ($-\text{COOH}$) grubu içerdiğinden, trikarboksilik asit özelliği gösterir.

N-(2-Karboksietil) İminodiasetik Asit, iminodiasetik asidin daha güçlü metal bağlayıcı bir türevidir. Biyoteknoloji, farmasötik ve çevresel alanlarda şelatlama ajanı olarak kullanılır.

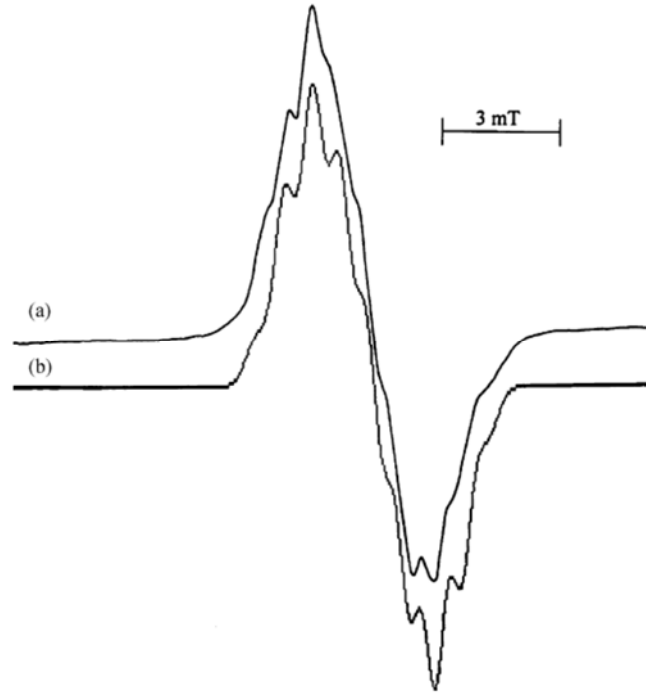
Fazladan bir karboksil ($-\text{COOH}$) grubu içerdiğinden, klasik iminodiasetik asitten farklı şelatlama ve çözünürlük özellikleri gösterir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 20 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

NCIDA'nın γ -ışınlanmış tozunun oda sıcaklığındaki spektrumu Şekil 1a'da gösterilmiştir(Osmanoğlu vd., 2011). Bu spektrum dokuz çizgiden oluşmaktadır ve bu spektruma ait radikalin, $\text{HOOCCH}_2\text{CH}_2\text{N}\dot{\text{C}}\text{HCH}_2(\text{COOH})_2$ şeklindedir. β -karbon atomundan bir hidrojen atomunun koparılmasıyla oluştuğu düşünülmektedir. Serbest elektronun β -proton, dört metilen protonu ve 14N çekirdeğiyle aşırı ince yapı etkileşimleri şu şekilde alınabilir: $a_{\text{CH}} = 1.27 \text{ mT}$, $a_{(\text{CH}_2)_2} = 0.68 \text{ mT}$, $a_{\text{N}} = 0.48 \text{ mT}$. Radikalin g değeri ise $g = 2.0029 \pm 0.0005$ olarak belirlenmiştir.

Bu aşırı ince yapı parametreleri kullanılarak simüle edilen spektrum Şekil 1b'de sunulmuştur ve deneysel ve simüle edilen EPR spektrumları arasındaki uyum iyidir.

Sonuç olarak, γ -ışınlamanın NCIDA'da 14N çekirdeğine bağlı karbon atomu ile COOH grubu arasındaki bağdan hidrojen atomunun kopmasına neden olduğu ifade edilebilir.



Şekil 1. a) NCIDA toz kristalinin EPR spektrumu b) Simülasyon spektrumu

İminodiasetik Asit Hidroklorür (IDAHCl)

Kimyasal Formül: $C_4H_8ClNO_4$

İminodiasetik asit hidroklorür, iminodiasetik asidin hidroklorür (HCl) tuzu formudur. Bu, onun çözünürlüğünü ve stabilitesini artıran bir özelliktir. IDAHCl, amino asitler gibi amin (-NH) ve karboksil (-COOH) gruplarına sahiptir.

İminodiasetik Asit Hidroklorür, metal iyonlarını bağlayan bir şelatlama ajanıdır ve biyokimyasal süreçlerde iyon kontrolü için kullanılır.

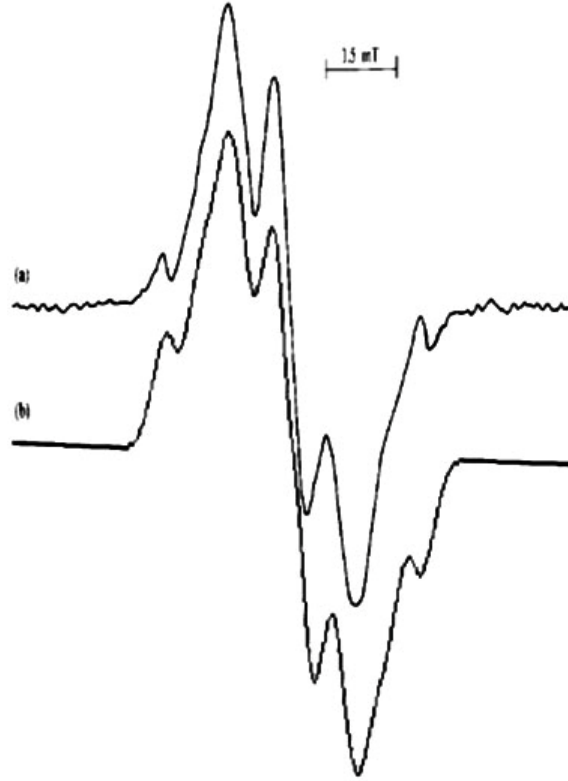
Farmasötik ve biyoteknolojik uygulamalarda, özellikle protein saflaştırma ve biyolojik tampon çözeltilerde önemli rol oynar.

Amino asitlerle bazı benzerlikleri olsa da, protein sentezinde yer almaz ve daha çok iyon bağlayıcı ajan olarak kullanılır.

Toz örnek, oda sıcaklığında 20 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

Gama ile ışınlanmış IDAHCl (İminodiasetik Asit Hidroklorür) tozlarının EPR spektrumu Şekil 2a gösterilmektedir (Aydın, 2009). Oluşan radikal $HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$ olarak tespit edilmiştir. Eşleşmemiş elektronun α -proton, iki metilen protonu, bir NH protonu ve 14N çekirdeği ile olan aşırı ince yapı etkileşimleri şu şekildedir: $a_{CH} = 1.23$ mT, $a_{CH_2} = 0.89$ mT, $a_{NH} = 0.48$ mT, $a_N =$

0.57 mT. Radikalın g-değeri ise $g = 2.0028 \pm 0.0005$ olarak belirlenmiştir. Bu aşırı ince yapı parametreleri kullanılarak simüle edilen spektrum, Şekil 2b'de gösterilmiştir. DeneySEL ve simüle edilen EPR spektrumları arasındaki uyum oldukça iyidir.



Şekil 2. a) IDA HCl toz kristalinin EPR spektrumu b) Simülasyon spektrumu

N-(2-Hidroksietil) İminodiasetik Asit (NHIDA)

Kimyasal Formül: $C_6H_{11}NO_5$

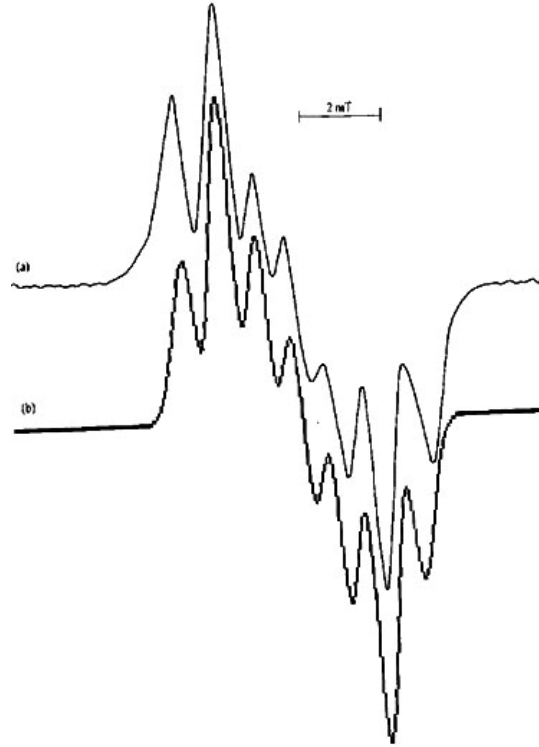
İminodiasetik asit (IDA) türevidir ve hidroksietil ($-CH_2CH_2OH$) grubu içerir. İki karboksil ($-COOH$) ve bir hidroksil ($-OH$) grubu taşıdığı için polarlık ve hidrojen bağları oluşturma yeteneği yüksektir.

N-(2-Hidroksietil) İminodiasetik Asit, metal iyonlarını bağlayan bir şelat ajanıdır ve biyokimya, ilaç ve biyoteknoloji alanlarında çeşitli uygulamalara sahiptir. İminodiasetik asit türevi olduğu için amino asitler ve biyomoleküllerle etkileşime girebilir. Farmasötik formülasyonlar, metal kompleksleme ve biyomedikal araştırmalarda önemli bir rol oynayabilir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 20 kGy'lık dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

NHIDA'nın gama ışınlamasından sonra kaydedilen EPR spektrumu Şekil 3a'da gösterilmektedir (Aydin vd., 2009). Spektrum 7 çizgiden oluşmaktadır ve bu spektruma karşılık gelen radikal $HOCH_2CH_2N\dot{C}HCH_2(COOH)_2$ şeklindedir. Bu radikalın α -karbon atomundan bir

hidrojen atomunun koparılmasıyla oluştuğu düşünülmektedir. Eşleşmemiş elektronun, α -proton, iki metilen protonu ve ^{14}N çekirdeği ile aşırı ince yapı etkileşimleri şu şekildedir: $a_{\text{CH}} = 1.45 \text{ mT}$, $a_{\text{CH}_2} = 0.76 \text{ mT}$, $a_{\text{N}} = 0.50 \text{ mT}$. Spektrumun g-değeri ise $g = 2.0030 \pm 0.0005$ olarak ölçülmüştür.



Şekil 3. a) NHIDA toz kristalinin EPR spektrumu b) Simülasyon spektrumu

İminodiasetik Asit (Toz) IDA

Kimyasal Formül: $\text{C}_4\text{H}_7\text{NO}_4$

Amino asitler gibi karboksil ($-\text{COOH}$) ve amin ($-\text{NH}$) grubu içerir, ancak α -karbon yapısına sahip olmadığı için klasik bir amino asit değildir. Bazı amino asitlerin türevlerinin sentezinde kullanılır.

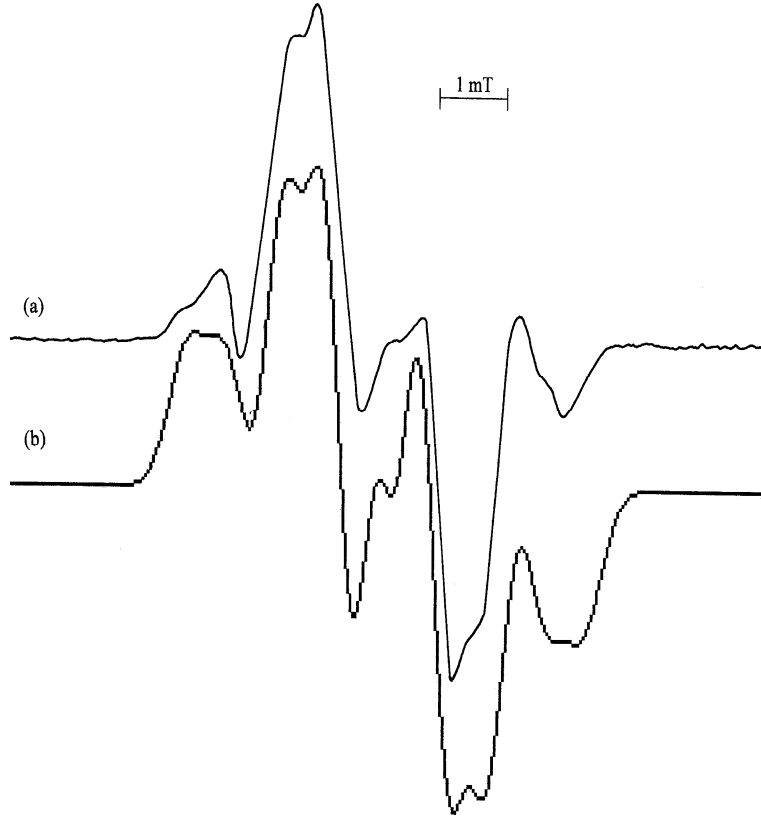
İminodiasetik asit, metal iyonlarını bağlayabilen bir şelat ajanıdır ve biyokimya, ilaç, tarım ve endüstriyel alanlarda geniş bir kullanım alanına sahiptir. Biyolojik sistemlerde iyon dengesi ve biyomoleküllerle etkileşimde önemli rol oynar. Amino asitler ile benzer fonksiyonel gruplar taşısa da klasik bir amino asit değildir, ancak bazı biyokimyasal süreçlerde yer alabilir.

Toz örnek, oda sıcaklığında 18 kGy 'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

Oda sıcaklığında γ -ışınlarına maruz kalmış IDA tozunun EPR spektrumu Şekil 4a'da gösterilmektedir (Aydın vd.,2008). Bu spektrum, $1:1:3:3:3:3:1:1$ yoğunluk dağılımına sahip sekiz çizgiden oluşabilir. Eşleşmemiş elektron, bir α -proton ve iki eşdeğer metilen protonu ile etkileşime girer. Bu protonlar manyetik olarak eşdeğerdir ve $1:3:3:1$ yoğunluk dağılımına sahip

çizgiler oluşturur. Her çizgi tekrar ili çizgiye yarılmıştır. Bunun nedeni ^{14}N çekirdeğine yakın bir protonun varlığından kaynaklanmaktadır. Ancak, azot bağlanma sabitinin küçük olması nedeniyle ^{14}N çekirdeği spektrumunda doğrudan çözülmemektedir. Deneysel ve simüle edilmiş EPR spektrumlarının birbiriyle iyi bir uyum içinde olduğu görülmüştür. Bu spektrum, $\text{HN}\dot{\text{C}}\text{HCH}_2(\text{COOH})_2$ radikaline atfedilebilir ve aşırı ince yapı etkileşim sabitleri şu şekildedir: $a_{\text{CHCH}_2} = 1.40 \text{ mT}$, $a_{\text{NH}} = 0.58 \text{ mT}$, $a_{\text{N}} = 0.39 \text{ mT}$. Spektrumun g-faktörü ise $g = 2.0031 \pm 0.0005$.

Sonuç olarak: γ -ışınlaması, IDA'daki karbon atomuna bağlı hidrojen atomlarının ^{14}N çekirdeğine ve $-\text{COOH}$ grubuna bağlandığı bağları kırmaktadır.



Şekil 4. a) IDA toz kristalinin EPR spektrumu b) Simülasyon spektrumu

İminodiasetik Asit (Tek Kristal)

Tek kristal örnek, oda sıcaklığında 15 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

Radikalin EPR spektrumu, ışınlamadan sonra birkaç ay boyunca oda sıcaklığında değişmeden kalmıştır. IDA'nın tek kristallerinde gama-ışınlamasıyla oluşan $\text{HN}\dot{\text{C}}\text{HCH}_2(\text{COOH})_2$ radikalleri, oda sıcaklığında EPR ile incelenmiştir (Başkan vd., 2008). Spektrumlar, Şekil 5-7'de gösterildiği gibi üç farklı desen sergilemektedir. Bu spektrumlar, manyetik alan sırasıyla c-, b- ve a*-eksenlerine paralel olduğunda gözlemlenmiştir. Ancak kristalin c, b ve a* eksenleri etrafında döndürülmesiyle g-faktöründe ve aşırı ince yapı etkileşim sabiti (a) değerlerinde değişiklikler gözlemlenmiştir. Bu değerlerin ortalamaları şu şekildedir: $g = 2.0028 \pm 0.0005$, $a = 1.83 \text{ mT}$.

Şekil 5-7'deki spektrumlar sırasıyla 4, 6 ve 24 çizgi içermektedir. Bu durum, eşleşmemiş bir elektron spini ile etkileşime giren dört proton ve bir azot çekirdeğinin aşırı ince yapı etkileşimlerini göstermektedir. Buna göre radikalın yapısı $\text{HN}\dot{\text{C}}\text{HCH}_2(\text{COOH})_2$ olarak belirlenmiştir. α -proton ve iki metilen protonunun aşırı ince yapı bölünmeleri anizotropiktir ve ortalama değerleri $a = 1.83 \text{ mT}$ 'dir. NH protonu ve azot çekirdeğinin aşırı ince yapı bölünmeleri izotropiktir ve aşırı ince yapı etkileşim sabitleri sırasıyla 0.97 mT ve 0.38 mT 'dir.

Tablo1. $\text{HN}\dot{\text{C}}\text{HCH}_2(\text{COOH})_2$ Radikalının EPR Parametreleri $\Delta g = \pm 0.0005$

Esas Eksen Değerleri(A mT)		Yön Kosinüsleri		
A_{CHCH_2}	$A_{xx} = 2.14 \pm 0.1$	0.9752	0.1844	-0.1224
	$A_{yy} = 2.04 \pm 0.1$	0.1767	0.9817	0.0711
	$A_{zz} = 1.32 \pm 0.1$	0.1333	0.0477	-0.9899
	$a = 1.83 \pm 0.1$			
A_{NH}	$a_{\text{iso}} = 0.97 \pm 0.1$			
a_{N}	$a_{\text{iso}} = 0.38 \pm 0.1$			
	$g_{xx} = 2.0038$	0.9871	-0.0967	0.1277
	$g_{yy} = 2.0023$	-0.0107	0.7559	0.6547
	$g_{zz} = 2.0022$	0.1598	0.6476	-0.7451
	$g_{\text{ort}} = 2.0028$			

α -proton ve iki metilen protonunun eşleşmemiş elektron ile aşırı ince yapı etkileşimleri için g tensörünün ve yön kosinüslerinin esas eksen değerleri Tablo 1'de verilmiştir.

Şekil 5'de gösterilen IDA tek kristalinin EPR spektrumu, 1:3:3:1 yoğunluk dağılımına sahiptir ve aşırı ince yapı etkileşim sabitleri şu şekildedir: $a_{\text{CHCH}_2} = 1.87 \text{ mT}$, $a_{\text{NH}} = 0.91 \text{ mT}$ ve $a_{\text{N}} = 0.35 \text{ mT}$.

Bu spektrum, gama ile ışınlanmış IDA tek kristalinin $B_0//c$ eksenini boyunca elde edilmiştir. Eşleşmemiş elektron, bir α -proton ve iki eşdeğer metilen protonu ile etkileşime girer. Bu protonların tümü manyetik olarak eşdeğerdir ve dört çizgili yoğunluk dağılımı gösterir. Ancak, ^{14}N çekirdeği ve NH protonu, küçük bağlanma sabitleri nedeniyle spektrumda ayırt edilemez.

Şekil 6'da gösterildiği gibi, IDA tek kristali için kaydedilen EPR spektrumu, yaklaşık olarak 1:3:4:4:3:1 yoğunluk düzenine sahiptir. Kristalin manyetik alandaki diğer yönelimleri için de bu spektrum gözlemlenmiştir. Bu spektrumun binom açılımı şu şekildedir:

$$1 : 3 : 3 : 1 + 1 : 3 : 3 : 1 = 1 : 3 : 4 : 4 : 3 : 1$$

Bu spektrumun aşırı ince yapı etkileşim sabitleri şu şekildedir: $a_{\text{CHCH}_2} = 1.26 \text{ mT}$, $a_{\text{NH}} = 0.91 \text{ mT}$ ve $a_{\text{N}} = 0.45 \text{ mT}$.

Şekil 7'de, manyetik alanın a^* eksenine paralel olduğu durumda elde edilen spektrum gösterilmiştir. Bu spektrum, çizgi yoğunlukları 1:1:1:1:1:1:3:3:3:3:3:3:3:3:1:1:1:1:1:1 şeklinde olan 24 çizgiden oluşmaktadır.

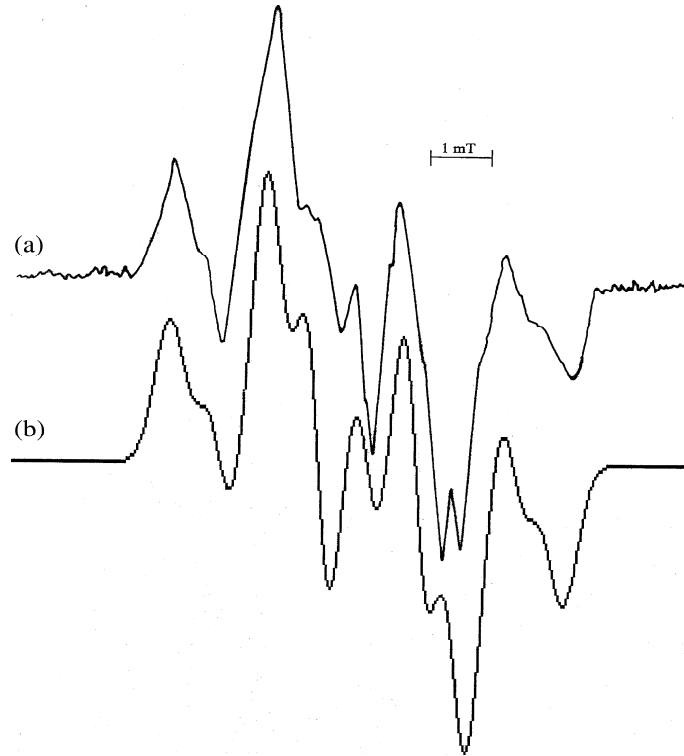
Spektrum, 1:3:3:1 yoğunluk dağılımına sahip altı grup dört çizgi içermektedir. Bu sonuçlar, eşleşmemiş elektronun bir α -proton ve iki metilen protonu ile aşırı ince yapı

bağlanmasını gösterir. Bu nedenle, iki metilen protonu ve α -protonu manyetik olarak eşdeğerdir.

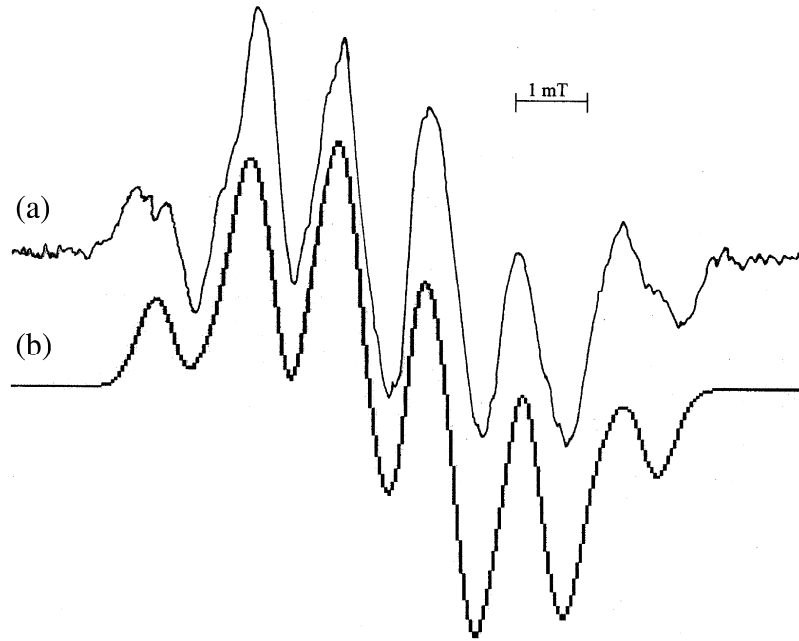
Her bir çizgi çifti 2.24 mT mesafeyle ikili (doublet) çizgilere bölünmüştür. Bu ikili çizgiler, ^{14}N çekirdeğine komşu bir protonun varlığından kaynaklanmaktadır ve izotropik aşırı ince yapı bağlanma sabiti 1.02 mT'dir.

Bu spektrum, 1:1:1 üçlüsü ile 1:1:3:3:3:3:1:1 sekizlisi olarak da yorumlanabilir. Üçlü çizgiler, ^{14}N çekirdeğinden kaynaklanmaktadır ve izotropik aşırı ince yapı bağlanma sabiti 0.35 mT'dir.

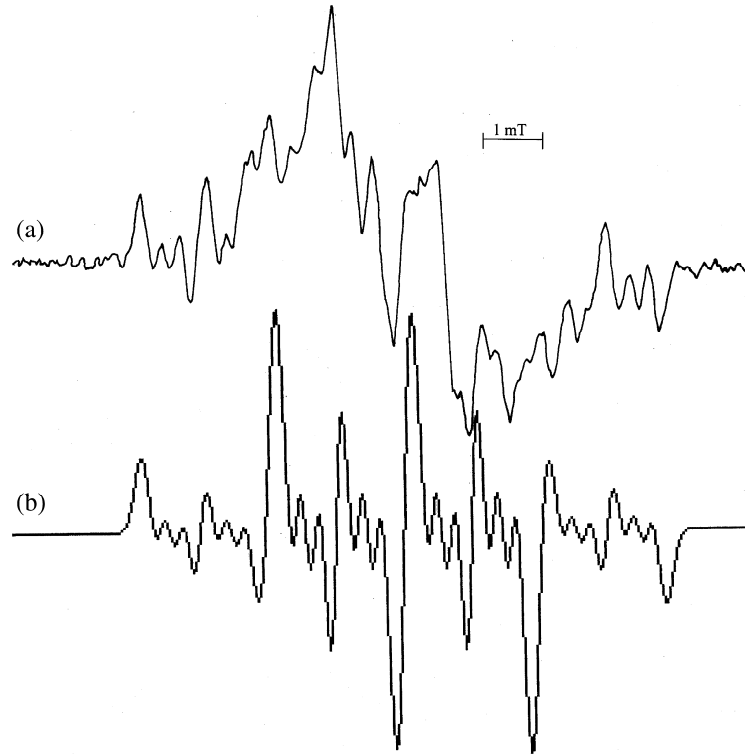
Sonuç olarak, gama ışınlaması IDA tek kristalinde serbest radikaller oluşturur. Bu radikaller, bir protonun koparılmasıyla meydana gelir.



Şekil 5. (a) $B_0//c$ eksenı boyunca elde edilen IDA tek kristalinin EPR spektrumu
(b) $a_{\text{CHCH}_2} = 1.87$ mT, $a_{\text{NH}} = 0.91$ mT, $a_{\text{N}} = 0.35$ mT ve çizgi genişliği 0.35 mT kullanılarak simüle edilmiş spektrum.



Şekil 6. a) $B_0//b$ eksenini boyunca elde edilen IDA tek kristalinin EPR spektrumu
(b) $a_{CHCH_2} = 1.26$ mT, $a_{NH} = 0.91$ mT, $a_N = 0.45$ mT ve çizgi genişliği 0.30 mT kullanılarak simüle edilmiş spektrum.



Şekil 7. a) $B_0//a^*$ eksenini boyunca elde edilen IDA tek kristalinin EPR spektrumu
(b) $a_{CHCH_2} = 2.24$ mT, $a_{NH} = 1.02$ mT, $a_N = 0.35$ mT ve çizgi genişliği 0.17 mT kullanılarak simüle edilmiş spektrum.

Metiliminodiasetik Asit (MIDA)

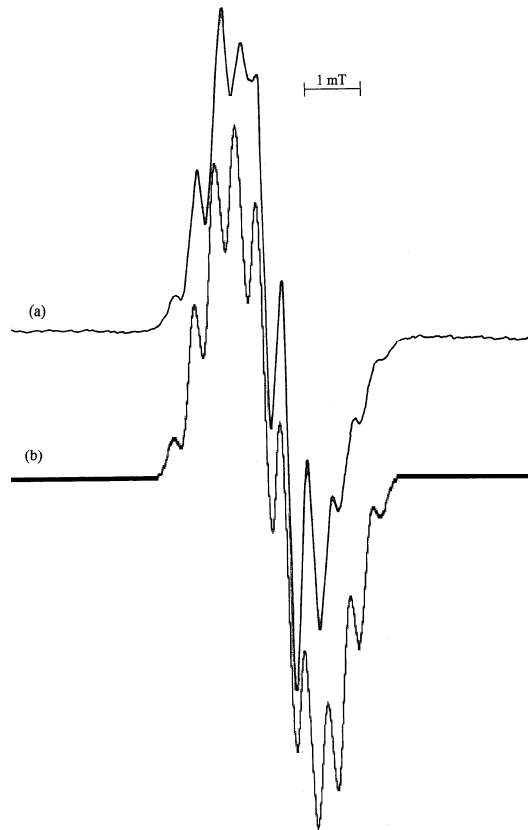
Kimyasal Formül: $C_5H_9NO_4$

İminodiasetik asit (IDA) türevidir. İçinde iki karboksilik asit ($-COOH$) fonksiyonel grubu bulunur. Suda çözünebilir ve zayıf bir asit karakteri gösterir.

Metiliminodiasetik asit, iminodiasetik asidin bir türevi olup, özellikle metal iyonları ile etkileşime girme kapasitesi nedeniyle endüstriyel ve biyoteknolojik alanlarda kullanılmaktadır.

Toz örnek, oda sıcaklığında 18 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

Oda sıcaklığında gama ışınlarına maruz bırakılan MIDA tozunun EPR spektrumu Şekil 8a'da gösterilmiştir (Aydın vd., 2008). Spektrum 10 çizgiden oluşmaktadır ve bu spektruma ait radikal, $H_3CN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$ dir. Bu radikalın α -karbon atomundan bir hidrojen atomunun koparılması sonucu olduğu düşünülmektedir. Serbest elektronun α -proton, iki metilen protonu, üç metil protonu ve ^{14}N çekirdeği ile aşırı ince yapı etkileşimleri şu şekilde ölçülmüştür: $a_{CH} = 1.34$ mT, $a_{CH_2} = 0.89$ mT, $a_{CH_3} = 0.68$ mT, $a_N = 0.53$ mT. Radikalın g değeri $g = 2.0030 \pm 0.0005$ olarak bekirlenmiştir. Bu aşırı ince yapı parametrelerle simüle edilen spektrum Şekil 8b'de gösterilmiştir. Deneysel ve simüle edilmiş EPR spektrumlarının iyi bir uyum gösterdiği belirlenmiştir.



Şekil 8. a) MIDA toz kristalinin EPR spektrumu b) Simülasyon spektrumu

İminodiasetik Asit Hidrobromür (Toz) IDAHBr

Kimyasal Formül: $C_4H_8BrNO_4$

İminodiasetik asit ($HOOC-CH_2-NH-CH_2-COOH$) yapısına sahiptir. İminodiasetik asidin tuz türevidir.

İminodiasetik Asit Hidrobromür, biyolojik sistemlerde: Metal iyonlarıyla etkileşim kurar (şelatör). Tıbbi görüntüleme ve ilaç geliştirme alanlarında rol oynar. Genellikle toksik olmayan, biyolojik uyumluluğu yüksek bir türevidir.

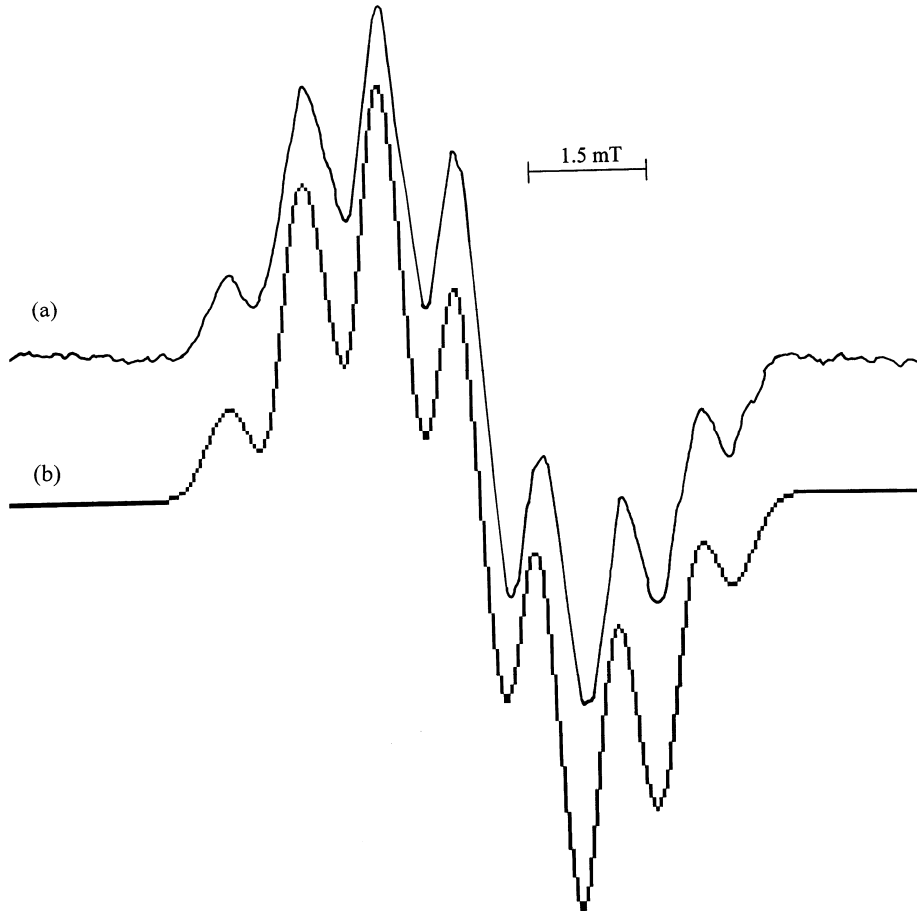
Toz örnek, oda sıcaklığında 20 kGy'lik dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

Gamma ışını ile ışınlanmış IDAHBr'nin karakteristik EPR spektrumu, Şekil 9a'da gösterildiği gibi 1:5:11:14:11:5:1 yoğunluk dağılımı sergilemektedir ve bu spektrum, $HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$ radikaline atfedilmektedir (Aydın, 2010). $HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$ radikali, α -protonu ve iki metilen protonunun manyetik olarak eşdeğer olması nedeniyle 1:3:3:1 yoğunluk dağılımı gösterir. NH protonlarının spektrumu Ayrıca, spektrumda NH protonu ve ^{14}N çekirdeği ($I=1$) ile eşit aşırı ince yapı sabitlerine sahip olmaları nedeniyle 1:2:2:1 yoğunluk dağılımına sahip 4 çizgi gözlenmektedir. Bu spektrum için binom açılımı şu şekilde verilmektedir:

$$1:2:2:1 + 3:6:6:3 + 3:6:6:3 + 1:2:2:1 = 1:5:11:14:11:5:1$$

Eşleşmemiş elektronların bir α -protonu, iki eşdeğer metilen protonu, bir NH protonu ve ^{14}N çekirdeği ile aşırı ince yapı etkileşim sabitleri şu şekilde verilmiştir: $a_{CHCH_2} = 1,03$ mT, $a_{NH} = 0,69$ mT, $a_N = 0,69$ mT ve çizgi genişliği 0.36 mT. Bu aşırı ince yapı sabiti parametrelerle simüle edilen spektrum Şekil 9b'de gösterilmiştir.

Ölçülen g faktörü değeri $g = 2.0029 \pm 0.0005$ olarak bulunmuştur. Sonuç olarak, gama ışını uygulaması, IDAHBr bileşiğinde, ^{14}N çekirdeğine ve COOH grubuna bağlı karbon atomundan bir hidrojen atomunun kopmasıyla serbest radikallerin oluşmasına neden olmuştur.



Şekil 9. a) IDA HBr toz kristalinin EPR spektrumu b) Simülasyon spektrumu

İminodiasetik Asit Hidrobromür (Tek Kristal) IDA HBr

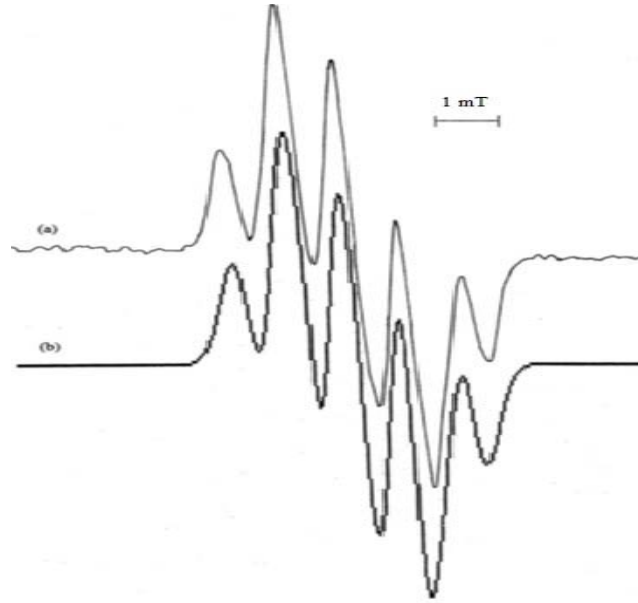
Tek kristal örnek, oda sıcaklığında 40 kGy'lık dozla gama ile radyasyona maruz bırakıldı.

IDA HBr tek kristallerinin ^{60}Co gama ışını kaynağı ile ışınlanmasından sonra, EPR spektrumları oda sıcaklığında ölçüldü (Aydın vd., 2010). Şekil 10–12'deki spektrumlar sırasıyla 5, 7 ve 10 çizgi göstermektedir ve bu da eşleşmemiş bir elektron spini ile dört proton ve azot çekirdeği arasındaki aşırı ince yapı etkileşimi göstermektedir; dolayısıyla bu radikal $\text{H}_2\text{N}\dot{\text{C}}\text{HCH}_2(\text{COOH})_2\cdot\text{Br}$ olmalıdır. Kristalde site yarılmaları (site splitting) gözlenmemektedir, bu nedenle kristalin birim hücreindeki moleküller manyetik olarak eşdeğerdir.

α -protonu ve iki metilen protonu ile ilgili aşırı ince yapı yarılmaları anizotropiktir ve ortalama değeri 0.8 mT'dir. Komşu ^{14}N çekirdeğine yakın bir proton ile azot çekirdeğinin aşırı ince yapı yarılmaları izotropiktir ve aşırı ince yapı sabitleri $a^{(1)\text{NH}} = a_{\text{N}} = 0.55 \pm 0.05$ mT olarak belirlenmiştir.

Radikalin g-değerleri hafifçe anizotropiktir ve ortalama değeri $g = 2.0031$ 'dir. IDA HBr'de elde edilen $\text{H}_2\text{N}\dot{\text{C}}\text{HCH}_2(\text{COOH})_2\cdot\text{Br}$ radikali için g ve aşırı ince yapı sabitlerinin mevcut değerleri Tablo 2'de verilmiştir.

Oda sıcaklığında gama ışınlarıyla ışınlanmış IDAHBr'nin EPR spektrumu, Şekil 10'da gösterildiği üzere, 1:4:6:4:1 yoğunluk dağılımı sergilemektedir. Bu spektrum, gama ile ışınlanmış IDAHBr tek kristalinin $B_0//a$ -ekseninde elde edilmiştir. Spektrum, eşleşmemiş elektronların bir α -proton, iki eşdeğer metilen protonu ve komşu ^{14}N çekirdeğine yakın bir proton ile aşırı ince yapı etkileşimini yansıtmaktadır ve bu protonların tamamı manyetik olarak yaklaşık olarak eşdeğerdir. Bu aşırı ince yapı parametrelerle simüle edilen spektrum Şekil 10b'de gösterilmiştir.



Şekil 10. (a) $B_0//a$ eksenini boyunca elde edilen gama ile ışınlanmış IDAHBr'nin EPR spektrumu ve (b) $a_{\text{CHCH}_2} = 0.9 \text{ mT}$, $a^{(1)}_{\text{NH}} = 0.6 \text{ mT}$ ve çizgi genişliği 0.3 mT kullanılarak spektrumun simüle edilmiş biçimi.

$\text{H}_2\text{NCHCH}_2(\text{COOH})_2\cdot\text{Br}$ radikali, bir α -proton ve iki eşdeğer metilen protonu nedeniyle 1:3:3:1 yoğunluk dağılımı gösterir. Ayrıca bu radikal, komşu ^{14}N çekirdeğine yakın bir proton ve ^{14}N çekirdeği ($I = 1$) ile eşit bağlanma sabitleriyle etkileştiği için 1:2:2:1 yoğunluk dağılımı da sergiler. Bu spektrumun binom açılımı şu şekildedir:

$$1:2:2:1 + 3:6:6:3 + 3:6:6:3 + 1:2:2:1 = 1:5:11:14:11:5:1$$

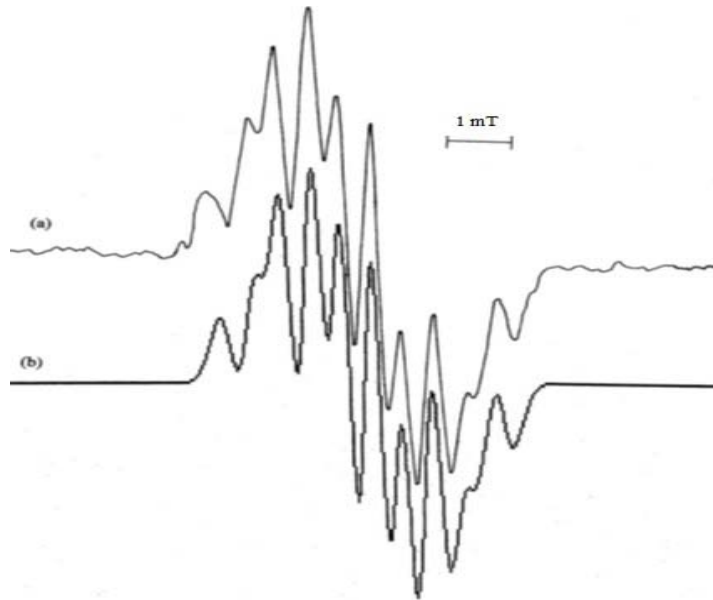
Bu binom açılımına karşılık gelen spektrum Şekil 11'de gösterilmiştir. $a_{\text{CHCH}_2} = 0.78 \text{ mT}$, $a^{(1)}_{\text{NH}} = 0.57 \text{ mT}$, $a_{\text{N}} = 0.57 \text{ mT}$ aşırı ince yapı parametrelerle simüle edilen spektrum Şekil 11b'de verilmiştir. Deneysel ve simüle edilmiş EPR spektrumlarının birbiriyle oldukça iyi örtüştüğü görülmüştür.

IDAHBr tek kristalinin EPR spektrumu Şekil 12'de gösterilmiştir. Spektrum, manyetik alan b -eksenine paralelken 1:2:5:7:9:9:7:5:2:1 yoğunluk dağılımına sahip 10 çizgiden oluşabilir. Aşırı ince yapı bağlanma sabitleri: $a_{\text{CHCH}_2} = 1.02 \text{ mT}$, $a^{(1)}_{\text{NH}} = 0.57 \text{ mT}$, $a_{\text{N}} = 0.55 \text{ mT}$, kullanılarak simüle edilen spektrum Şekil 12b'de gösterilmiştir. Deneysel ve simüle edilmiş EPR spektrumları arasında iyi bir uyum olduğu görülmüştür.

EPR spektrumlarının analizi, gama ışınına uğramış IDAHBr tek kristallerinde $\text{H}_2\text{N}\dot{\text{C}}\text{HCH}_2(\text{COOH})_2\cdot\text{Br}$ serbest radikal türlerinin varlığını göstermektedir. Gama ışınlamasının IDAHBr bileşiğinde ^{14}N çekirdeğine ve $-\text{COOH}$ grubuna bağlı karbon atomundaki hidrojen bağı kopardığını söyleyebiliriz.



Şekil 11. (a) B_0 // c-ekseni yönünde elde edilen gama ile ışınlanmış IDAHBr'nin EPR spektrumu (b) $a\text{CHCH}_2 = 0.78$ mT, $a(1)\text{NH} = 0.57$ mT, $a\text{N} = 0.57$ mT ve çizgi genişliği = 0.4 mT değerleri kullanılarak spektrumun simüle edilmiş şekli.



Şekil 12. a) B_0 // b-ekseni yönünde elde edilen gama ile ışınlanmış IDAHBr'nin EPR spektrumu b) $a\text{CHCH}_2 = 1.02$ mT, $a(1)\text{NH} = 0.57$ mT, $a\text{N} = 0.55$ mT ve çizgi genişliği = 0.27 Mt değerleri kullanılarak spektrumun simüle edilmiş şekli.

Tablo2. $H_2N\dot{C}HCH_2(COOH)_2.Br$ Radikalinin EPR Parametreleri $\Delta g = \pm 0.0005$.

Esas Eksen Değerleri(A mT)		Yön Kosinüsleri		
A_{CHCH_2}	$A_{xx} = 0.99 \pm 0.05$	0.9946	0.0559	-0.0873
	$A_{yy} = 0.71 \pm 0.05$	0.0064	0.8073	0.0711
	$A_{zz} = 0.69 \pm 0.05$	0.1333	0.0477	-0.8026
	$a = 0.80 \pm 0.05$			
$A^{(1)}_{NH}$	$a_{iso} = 0.55 \pm 0.05$			
a_N	$a_{iso} = 0.55 \pm 0.05$			
	$g_{xx} = 2.0036$	- 0.8023	0.5923	0.0742
	$g_{yy} = 2.0035$	0.5929	0.8052	- 0.0162
	$g_{zz} = 2.0022$	0.0694	-0.0309	0.9971
	$g_{ort} = 2.0031$			

SONUÇLAR

Tablo 3. Bazı İminodiasetik Asit Türevlerinin EPR Parametreleri

Bileşik Adı	Oluşan Radikal	g Değeri (± 0.0005)	a Değerleri (mT)
N-(2-Karboksietil) iminodiasetik asit	$HOOCCH_2CH_2N\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	2.0029	$a_{CH} = 1.27, a_{(CH_2)_2} = 0.68,$ $a_N = 0.48$
İminodiasetik asit Hidroklorür	$HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	2.0028	$a_{CH} = 1.23, a_{CH_2} = 0.89,$ $a_{NH} = 0.48, a_N = 0.57$
N-(2-Hidroksietil) iminodiasetik asit	$HOCH_2CH_2N\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	2.0030	$a_{CH} = 1.45, a_{CH_2} = 0.76, a_N$ $= 0.50$
İminodiasetik asit (Toz)	$HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	2.0031	$a_{CHCH_2} = 1.40, a_{NH} = 0.58,$ $a_N = 0.39$
İminodiasetik asit (Tek Kristal)	$HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	2.0028	$a_{CHCH_2} = 1.83, a_{NH} = 0.97,$ $a_N = 0.38$
Metiliminodiasetik asit	$H_3CN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	2.0030	$a_{CH} = 1.34, a_{CH_2} = 0.89,$ $a_{CH_3} = 0.68, a_N = 0.53$
İminodiasetik asit Hidrobromür (Toz)	$HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	2.0029	$a_{CHCH_2}=1.03, a_{NH}=0.69,$ $a_N=0.69$
İminodiasetik asit Hidrobromür (Tek Kristal)	$H_2N\dot{C}HCH_2(COOH)_2.Br$	2.0031	$a_{CHCH_2}=8.00, a^{(1)}_{NH}=5.50,$ $a_N=5.50$

g ve a Değerlerinin Karşılaştırılması ve Yorumlanması

g Değerleri:

- Tüm bileşiklerin g-değeri 2.0028 ile 2.0031 arasında değişmektedir (Tablo 3).

- Bu aralık, karbon merkezli aminoalkil radikaller için tipiktir ve spin yoğunluğunun karbon atomlarında lokalize olduğunu göstermektedir (Tablo 4).
- Hafif sapmalar, radikalın çevresindeki atomların doğası ve moleküler yapıya bağlıdır (örneğin, hidroksil veya metil grubu varlığı).

a Sabitleri:

- a_{CH} değerleri, genellikle 1.2–1.45 mT arasında seyretmiştir. En yüksek değer N-(2-Hidroksietil) IDA'da (1.45 mT) gözlenmiştir. Bu, hidroksil grubunun etkisiyle α -proton üzerindeki spin yoğunluğunu artırabileceğini düşündürür.
- a_{CH_2} değerleri 0.68–0.89 mT aralığındadır. Metil grubu içeren Metil-IDA'da CH_3 protonları için ek bir $a_{CH_3} = 0.68$ mT değeri de ölçülmüştür.
- a_{NH} değerleri, genellikle 0.48–0.97 mT aralığında değişmiş olup, en büyük bağlanma NH protonuna sahip IDA (tek kristal) örneğinde gözlemlenmiştir.
- a_N değerleri çoğu örnekte 0.38–0.69 mT arasında olup, ^{14}N çekirdeği ile elektron arasında net bir etkileşim bulunduğunu göstermektedir.

Kristal Formların Etkisi:

- Tek kristal örneklerinde, yönlenmeye bağlı olarak anizotropik etkileşimler gözlemlenmiştir. Özellikle IDA ve IDA HBr tek kristallerinde daha geniş a_{CHCH_2} değerleri (~1.83 mT ve 0.80 mT) ve daha net yön kosinüsleri ölçülmüştür.
- Kristal yapıdaki moleküllerin manyetik olarak eşdeğer olması, site yarılmalarını önlemiş ve daha net spektrumların elde edilmesini sağlamıştır.

Radikal Yapılarının Benzerliği:

- Çoğu radikal yapısı $HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$ iskeletine dayanmaktadır; bu, iminodiasetik asit türevlerinin ışınlamadan sonra ortak bir parçalanma/dissosiyasyon mekanizması izlediğini göstermektedir.
- Substitüent gruplar (karboksil, hidroksil, metil) bu iskelet üzerine eklenmekte ve radikalın dağılımını/karakterini etkilemektedir.
- Işınlama sonrası iminodiasetik asit türevlerinde meydana gelen radikal türleri oldukça benzer yapıdadır, ancak küçük yapısal farklar (örn. CH_3 , OH , kristal ortam) manyetik parametrelerde ölçülebilir değişikliklere neden olmuştur.
- EPR ile elde edilen parametreler, ışınlamaya karşı moleküler tepkilerin detaylı bir haritasını sunmakta, radikal oluşum mekanizmalarını aydınlatmaktadır.

Tablo 4. Bazı Aminoalkil Radikallerinin EPR Parametreleri

Amin Örneği	Radikal	Aşırı İnce Yapı Sabiti(mT)					g Değerleri
		a^H_α	a^H_β	a^H_γ	a^N	$a^N_{NH_2}$	
Dimetilamin	$\dot{C}H_2NHCH_3$	1.09	-	0.42	0.58	0.63	2.0028
Trimetilamin	$(CH_3)_2N\dot{C}H_2$	1.34	-	0.37	0.70	-	2.0028
n-propilamin	$CH_3CH_2\dot{C}H_2NH_2$	1.46	1.64	-	0.48	0.48	2.0026
Trietilamin	$(C_2H_5)_2N\dot{C}HCH_3$	1.37	1.96	0.23	0.52	-	2.0031
İminodiasetk asit(Sulu Çözeltiler)	$^-OOCCH_2NH\dot{C}HCOO^-$	1.28	-	0.56	0.68	0.51	2.0033
İminodiasetk asit(Toz)	$HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	1.40	-	1.40	0.39	0.58	2.0031
İminodiasetk asit(Tek Kristal)	$HN\dot{C}HCH_2(COOH)_2$	1.83	-	1.83	0.38	0.97	2.0028

EPR spektrumlarındaki çizgi şiddetlerinin karşılaştırılması ve Yorumlanması

Çizgi şiddeti, spektrumda eşleşmemiş elektronun çevresindeki çekirdeklerle (özellikle proton ve azot çekirdekleriyle) olan aşırı ince yapı (hyperfine splitting) etkileşimlerinin doğrudan bir sonucudur. Bu etkileşimler, çekirdek spinleri ve manyetik eşdeğerlikleri doğrultusunda karakteristik dağılımlar oluşturur.

Proton Sayısı ve Eşdeğerlik

- Daha fazla sayıda ve eşdeğer olmayan proton → daha karmaşık ve daha çok çizgi içeren spektrumlara neden olur (örn. MIDA, IDA HBr).
- Protonlar manyetik olarak eşdeğer ise binom dağılımlar oluşur (örn. 1:3:3:1), bu da çizgi şiddetlerinde düzenli desenler oluşturur.

Azot ve NH Etkileşimi

- ^{14}N çekirdeği (spin = 1) ve NH protonlarının etkisiyle çizgiler ikili yapılar haline gelir (doublet).
- NH ve N'nin bağlanma sabitleri birbirine yakın olduğunda çizgiler üst üste biner ve karmaşık desenler oluşur. IDA HBr örneğinde 1:5:11:14:11:5:1 gibi dağılım bunun örneğidir.

Kristal ve Toz Farkı

- Tek kristal örneklerde, spektrum kristalin manyetik alana göre yönelimine bağlı olarak değişkenlik gösterir.
- Bu durumda çizgi şiddeti ve ayırma düzeyi de artar. Örneğin IDA (tek kristal), 24 çizgiye kadar çıkabilen anizotropik desenler sergilemiştir.

Fonksiyonel Grupların Etkisi

- Metil (CH_3) grubunun varlığı çizgileri üçlü yapar, bu da spektrumda daha fazla çizgiye ve karmaşıklığa neden olur (MIDA örneği).
- Hidroksil (OH) ve karboksil grupları spin yoğunluğunun yönlendirilmesini etkileyerek çizgi şiddetlerini değiştirir.

Çizgi şiddeti dağılımları, EPR spektrumlarında hem yapısal bilgiyi hem de manyetik çevreyi yansıtan çok önemli parametrelerdir. Çalışmadaki örnekler arasında:

- En düzenli binom dağılımlar IDA ve türevlerinin $\text{CH}_2\text{—CH—NH}$ yapılarını yansıtır.
- En kompleks şiddet desenleri, hem fazla proton içeren (MIDA, IDAHBr) hem de kristal örneklerinde (IDA, IDAHBr tek kristal) gözlemlenmiştir.
- Çizgi şiddeti değişimleri, radikalin lokalizasyonu, protonların eşdeğerliği, çekirdek spinleri ve moleküler geometri ile doğrudan ilişkilidir.

Genel Sonuç

Bu çalışma, gama ışınları ile ışınlanmış iminodiasetik asit (IDA) ve çeşitli türevlerinin Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektroskopisi kullanılarak serbest radikal yapılarının incelenmesini amaçlamıştır. Bu tür bileşikler, metal iyonlarını bağlama kabiliyetleri ve biyolojik sistemlerle etkileşimleri nedeniyle endüstriyel, çevresel ve biyoteknolojik uygulamalarda geniş bir kullanım alanına sahiptir. Bu bağlamda, ışınlama sonrası meydana gelen yapısal değişimlerin anlaşılması, hem malzeme güvenliği hem de biyolojik etkiler açısından büyük önem taşımaktadır.

Çalışma kapsamında; IDA'nın çeşitli tuz ve fonksiyonel grup türevleri (HCl, HBr, metil, hidroksietil, karboksietil) hem toz hem de tek kristal formlarında analiz edilmiştir. Her bileşiğe ait EPR spektrumları kaydedilmiş, g-faktörleri ve aşırı ince yapı sabitleri belirlenmiştir. Elde edilen spektrumlar, serbest radikal yapılarına ait simülasyon programı ile oluşturulan modellerle karşılaştırılarak yorumlanmıştır.

Elde edilen başlıca bulgular şunlardır:

- Tüm bileşiklerde g-faktörleri 2.0028–2.0031 aralığında bulunmuş ve bu değerler karbon merkezli aminoalkil radikal yapılarla uyumlu sonuçlar vermiştir (Tablo 4).
- Elde edilen aşırı ince yapı sabitleri, radikallerin olduğu bölgelere ve radikal üzerindeki elektron yoğunluğu dağılımına dair detaylı bilgi sunmuştur.
- Toz ve tek kristal örnekler karşılaştırıldığında, tek kristal örneklerin daha ayrıntılı ve yönlenebilir spektrumlar sunduğu gözlemlenmiştir. Bu durum, kristal yapının radikal stabilitesi ve spin yoğunluğu dağılımı üzerindeki etkisini göstermektedir.
- Bazı radikal türlerinin spektral özellikleri aylarca sabit kalmış, bu da kristal ortamda yüksek yapısal stabiliteye işaret etmektedir.

- Tablo 4'te görüldüğü gibi tüm örneklerdeki a değerleri aminoalkil radikalleri için verilen değerlerle uyumludur (Başkan vd.,2008; Fessenden ve Neta, 1971; Wood, D.E. ve Lloyd,1970)

Bu çalışma, EPR spektroskopisinin iminodiasetik asit türevlerinde radyasyonla oluşan serbest radikal yapıların tespit ve karakterizasyonunda yüksek hassasiyet sunduğunu ortaya koymuştur. Bulgular, bu bileşiklerin radyasyon stabiliteleri, radikal oluşum mekanizmaları ve fonksiyonel grup etkileri hakkında detaylı bilgi sağlayarak hem temel bilimsel literatüre hem de uygulamalı alanlara (ilaç geliştirme, malzeme mühendisliği, radyasyon biyolojisi gibi) katkı sunmaktadır. Ayrıca, gama ışınına maruz kalabilecek biyomedikal ve endüstriyel sistemlerde bu tür bileşiklerin güvenli kullanımı açısından da rehber niteliğindedir.

Son olarak, elde edilen veriler ışığında, IDA ve türevlerinin ışınlamaya verdiği yanıtlar arasındaki farklılıklar yapısal düzeyde net biçimde ortaya konulmuştur. Bu tür sistematik ve karşılaştırmalı çalışmalar, yalnızca bir bileşiğin değil, aynı zamanda türevlenmiş versiyonlarının da nasıl davranacağını öngörmeye olanak sağlar. Böylece gelecekte bu tür bileşiklerin kontrollü bir şekilde fonksiyonelleştirilmesi, modifiye edilmesi veya stabilize edilmesi yönünde yapılacak çalışmalara bilimsel zemin hazırlar.

KAYNAKLAR

- Aydın, M, Osmanoğlu Y. & Başkan M.H.(2008) “ Electron paramagnetic resonance of γ -irradiated glycyl-L-glutamine monohydrate, iminodiacetic acid and methyliminodiacetic acid”, Radiat Eff Defects Solids,163; 47-53.
- Aydın, M. (2010) “EPR investigation of gamma-irradiated iminodiacetic and amino acid derivatives”, Bulgarian Chemical Communications, 42(3); 232 – 235.
- Aydın, M., Osmanoğlu, Ş. , Başkan,M.H. & Dicle, I.Y. (2010) “Radiation damage produced in single crystal of iminodiacetic acid hydrobromide” J. Mol. Struc.,975; 30-32.
- Aydin M, Baskan M.H. & Osmanoglu Y.E.(2009) “EPR Study of Gamma Induced Radicals in Amino and Iminodiacetic Acid Derivatives”, Brazilian Journal of Physics,39;583-586.
- Aydin, M.(2009) “Identification of Free Radicals Induced by Gamma Irradiation in Amino Acid Derivatives”, Brazilian Journal of Physics, 40;306-308.
- Başkan, M.H., Aydın, M. & Osmanoğlu, Ş.(2008) “EPR of γ -irradiated single crystal of iminodiacetic acid”, Radiat Eff Defects Solids,163; 65-70.
- Fessenden, R.W. & Neta, P., (1971).”Electron Spin Resonance study of radicals produced in irradiated aqueous of amines and amino acids”, J. Phys. Chem., 75; 738-748.
- Işıkçı, N.İ. & Osmanoğlu, Y.E.(2020)“Gamma Irradiated of Amino Acid Derivatives Examined by EPR and Simulation Methods,” El-Cezeri, J.Science and Engineering, 7(3); 1371-1376.
- McKelvey, R.D. (1987) “Huckel MO theory and electron spin resonance in the spectroscopy Course”, J. Chem. Educ., 64; 497-498.

- 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*, **A78**;1611-1614.
- Osmanoğlu, Y.E & Sütçü K.,(2023)." Electron Spin Resonance Study of Free Radicals Induced in Single Crystal of Oxcarbazepine", *Applied Magnetic Resonance*, **54**; 751-759.
- Sütçü, K, Osmanoğlu Y.E.(2024) "EPR Investigation of Gamma-Irradiated Tiopronin", *Applied Magnetic Resonance*, **55**(6); 585-597.
- Sütçü, K. & Osmanoğlu, Y. E., (2023)." Identification of free radicals formed in gamma-irradiated acetazolamide using electron paramagnetic resonance spectroscopy", *Applied Magnetic Resonance*, **54**(8); 737-750.
- Sütçü, K.(2024) "A study to identify and analyze the radiosensitivity of 4-piperidinecarboxylic acid using electron paramagnetic resonance spectroscopy," *Applied Magnetic Resonance*, **55**(5); 537-549.
- Wood, D.E. & Lloyd, R.V., (1970)."EPR of Free Radicals in an Adamantane Matrix. I. Aliphatic Aminoalkyl Radicals", *J. Chem. Phys.*, **53**; 3932-3942.

Yazar Katkısı

Bu çalışmada, araştırma konusunun belirlenmesi, literatür taramasının yapılması, analizlerin gerçekleştirilmesi ve metnin yazımı ortak yazarlar tarafından gerçekleştirilmiştir. Kullanılan yöntemlerin seçimi, analizlerin uygulanması ve sonuçların yorumlanması aşamalarında titizlikle çalışılmıştır. Grafiklerin oluşturulması ve makalenin nihai düzenlemeleri de yazarların ortak katkılarıyla tamamlanmıştır.

Etik Beyan

Derleme makaleleri için Etik Kurul Onayı gerekmemektedir.

Çıkar Çatışması

Yazarlar, herhangi bir çıkar çatışması bulunmadığını beyan etmektedir.