



Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi Institute of Natural and Applied Science Journal

Dergi ana sayfası/ Journal home page: <https://dergipark.org.tr/tr/pub/kujs>



E-ISSN: 2587-2389

Gama ile Işınlanmış Glisinamid Hidroklorür Toz Kristallerinin Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) İncelenmesi

Mehmet Halim BAŞKAN^{1*}

¹Dicle Üniversitesi, Ziya Gökalp Eğitim Fakültesi, Matematik ve Fen Bilimleri Eğitimi Bölümü, Diyarbakır, Türkiye

(İlk Gönderim / Received: 17. 04. 2025, Kabul / Accepted: 07. 05. 2025, Online Yayın / Published Online: 31.07.2025)

Anahtar Kelimeler:

Amino Asit Türevi,
Elektron Paramanyetik
Serbest Radikal.

Özet: Bu çalışmada, gama ışınları ile ışınlanmış Glisinamid Hidroklorür (GAHCl) toz kristallerinde oluşan serbest radikal yapılar, Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektroskopisi kullanılarak incelenmiştir. 20 kGy dozda ışınlanan örneğin EPR spektrumları kaydedilmiş ve ışınlama sonucu oluştuğu düşünülen $H_2N\dot{C}HCONH_2$ radikali tespit edilmiştir. Elde edilen EPR parametreleri (g-değeri: 2.0036, çizgi genişliği: 0.90 mT, aşırı ince yapı sabitleri: $a_{CH} = 1.23$ mT, $a_N = 0.48$ mT), simülasyon verileriyle uyumlu olup literatürdeki benzer glisin türevleriyle karşılaştırıldığında tutarlıdır. Ayrıca örneğin kimyasal ve biyolojik özellikleri kapsamlı bir şekilde araştırılmıştır. Bu sonuçlar, gama ışınlarının amino asit türevlerinde oluşturduğu yapısal değişikliklerin anlaşılması açısından önemli veriler sunmakta ve Glisinamid Hidroklorür'ün model bileşik olarak biyolojik ve farmasötik araştırmalarda kullanılabilirliğini göstermektedir.

Electron Paramagnetic Resonance (EPR) Study of Gamma-Irradiated Glycinamide Hydrochloride Powder Crystals

Keywords:

Amino Acid Derivative,
Electron Paramagnetic
Free Radicals.

Abstract: In this study, free radical structures formed in gamma-irradiated Glycinamide Hydrochloride (GAHCl) powder crystals were investigated using Electron Paramagnetic Resonance (EPR) spectroscopy. EPR spectra of the sample irradiated with a dose of 20 kGy were recorded, and the $H_2N\dot{C}HCONH_2$ radical, presumed to have formed as a result of irradiation, was identified. The obtained EPR parameters (g-value: 2.0036, line width: 0.90 mT, hyperfine coupling constants: $a_{CH} = 1.23$ mT, $a_N = 0.48$ mT) were consistent with the simulation data and matched the values reported for similar glycine derivatives in the literature. Additionally, the chemical and biological properties of the sample were comprehensively investigated. These findings provide significant insights into the structural changes induced by gamma irradiation in amino acid derivatives and demonstrate the potential of Glycinamide Hydrochloride as a model compound in biological and pharmaceutical research.

*İlgiliyazar: hbaskan@dicle.edu.tr
DOI: 10.58688/kujs.1678458

1. GİRİŞ

Elektron Paramanyetik Rezonans(EPR) spektroskopisi, serbest radikallerin yapısal özelliklerini incelemek ve kimliklerini belirlemek amacıyla kullanılan etkili tekniklerden biridir. Bu yöntem, amino asitler ve onların türevleri başta olmak üzere, gıda ürünleri ve ilaçlar gibi birçok farklı maddede oluşan hasar merkezlerinin tespiti için yaygın olarak tercih edilmektedir(Dicle ve ark. 2015; Sütçü, 2024; Osmanoğlu ve Sütçü, 2023; Sütçü ve Osmanoğlu, 2023; Sütçü ve ark., 2014; Osmanoğlu ve ark.,2017; Osmanoğlu, 2020).

Glisin(Glycine), biyolojik sistemlerde önemli roller üstlenen temel bir amino asittir. Doğal proteinlerin yapı taşlarından biri olan glisin, pek çok hücreyel işlevde görev alır ve çeşitli biyokimyasal süreçlerin temel bileşenlerinden biridir. Aynı zamanda, insan yaşamı için gerekli olan 20 temel amino asitten biri olarak kabul edilir. Glisinamid hidroklorür(GAHCl), glisinin amid türevi olup monohidroklorür tuzu şeklinde bulunur. Doğrudan biyolojik bir rolü olan doğal bir amino asit değildir, ancak türev bir bileşiktir. Glisin türevi olduğu için bazı biyokimyasal yollarla ilişkilendirilebilir(örneğin peptit ya da protein sentezi çalışmaları). Peptit sentezi ya da biyolojik tampon sistemlerinde kullanılabilir. Ayrıca, hücre zarından geçiş kolaylığı ve düşük toksisitesi sayesinde biyomedikal uygulamalarda tercih edilebilir. Gama ışınlamasıyla serbest

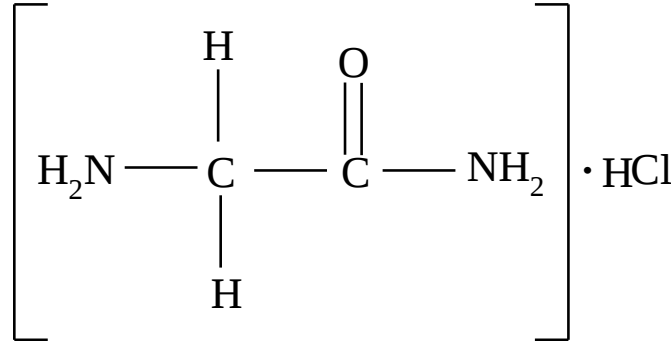
radikal yapılar oluşturarak, Elektron Paramanyetik Rezonans(EPR) çalışmalarında da model madde olarak kullanılır. Bu yönleriyle glisinamid hidroklorür, hem farmasötik hem biyoteknolojik araştırmalarda önemli bir araçtır. Bu neden bu çalışmada Glisinamid Hidroklörürün gama ışınlaması sonucu oluşan paramanyetik bozuklukları belirlemek amaçlanmıştır.

2. MATERYAL VE YÖNTEM

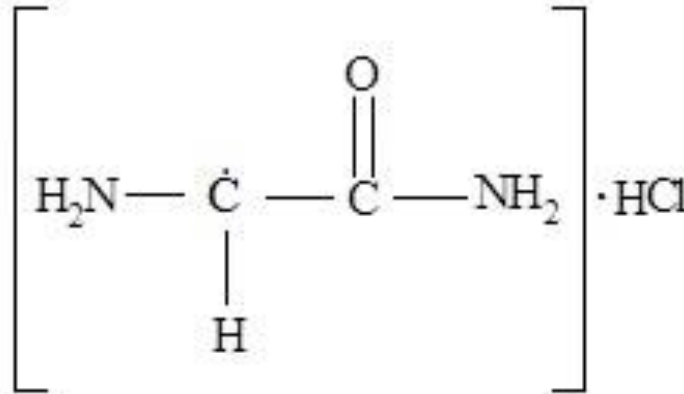
GAHCl nin toz örneği ^{60}Co γ (gama)-ışını kaynağı ile oda sıcaklığında 20 kGy doz oranında ışınlanmıştır. g değeri (spektroskopik yarılma faktörü) dipenhylicrylhydrazyl(DPPH) örneği ($g = 2.0036$) ile karşılaştırılarak hesaplanmıştır. Spektrumlar simülasyon programı kullanılarak simüle edilmişlerdir(McKelvey 1987). Örnekte oluşan radikalin kararlı olduğu tespit edilmiştir. Elde edilen GAHCl'nin toz spektrumları, Bruker EMX081 spektrometresinde 2 mW mikrodalga gücünde modülasyon genliği ve 0.2 mT manyetik alan modülasyon frekansı 100 kHz değerlerinde spektrumlar kaydedilmiştir.

3. BULGULAR VE TARTIŞMA

Glisinamid hidroklorür, kapalı formülü $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CONH}_2\cdot\text{HCl}$ ve molekül ağırlığı 110.54 g/mol dür. Kimyasal yapısı ise şekil 1'deki gibidir.



Şekil 1. Glisinamid Hidroklorür'ün molekül formülü



Şekil 2. Işınlanma sonucu oluşan Glisinamid hidroklorür radikali

Toz halindeki Glisinamid hidroklorür (GAHCl), 20 kGy doz değerinde oda sıcaklığında gama- ışınları ile 10 saat ışılandı ve EPR spektrumları kaydedildi. 20 kGy doz değerinde ışılanmış GAHCl nin deneysel spektrumu Şekil 3 (a)'da verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi GAHCl'nin EPR spektrumu geniş tek bir çizgi sergilemiştir.

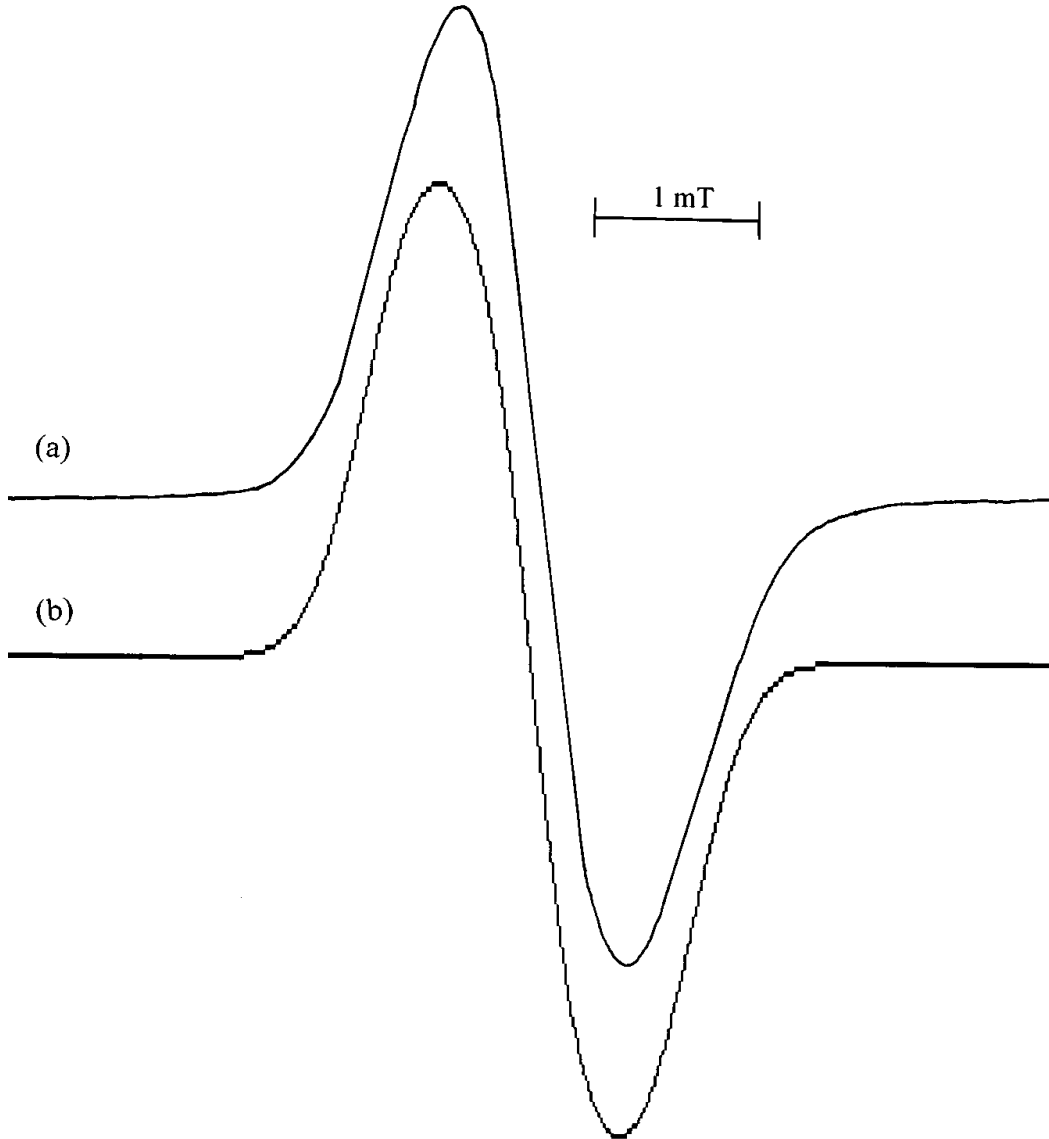
Aşırı İnce Yapı(a.i.y.) etkileşme sabitleri $a_{CH}=1.23$ mT, $a_N=0.48$ mT kullanılarak simüle spektrum elde edilmiştir (Şekil 3 b). Deneysel spektrumla simüle spektrumun uyuştugu görülmektedir.

Deneysel EPR spektrumundan g değeri $g = 2.0036$ olarak hesaplanmıştır. Çizgi genişliği ΔH 0.9 mT olarak ölçülmüştür. Şekil 3'te verilen geniş tek çizginin oluşum nedeni, eşlenmemiş elektronun merkezi karbon atomuna bağlı α protonu ve azot protonu ile etkileşmesidir. Çizgi genişliği çok büyük, yani a_{CH} değerine yakın, a_N değerinden oldukça büyük olması dolayısıyla aşırı ince yapı yarılmaları

gözlenmemektedir. Benzer durum önceki çalışmalarda da gözlemlenmiştir (Başkan ve ark.2010; Şimşek ve ark. 2017).

Işınlama sonucu yapıda oluştuğu düşünülen radikal Şekil 2'de verilmiştir.

Glisin Hidroklorür, Gly-gly glisin, Gly-gly hidroklorür, L-Alanil glisin ve glisin L-Histidin gibi glisin türevi örneklerde g değeri 2.0031-2.0044 aralığında bulunmuştur (Osmanoğlu ve ark. 2017). GAHCl örneğinde bulunan $g = 2.0036$ değeri bu aralık değerleri içerisinde. Glisin türevi örneklerin çoğunda karbon merkezli radikaller elde edilmiştir(Zincircioğlu ve ark. 2006; Başkan, 2008;Osmanoğlu, 2020; Aydın ve ark.,2008). Örneğimizde elde edilen $H_2N\dot{C}HCONH_2$ radikali de karbon merkezli bir radikaldır. Elde edilen sonuçlar glisin türevleriyle daha önce yapılan çalışmalarla uyumludur(Aydın, 2011; Zincircioğlu ve ark. 2006).



Şekil 3. a)Gama ışınları ile ışılanmış Glisinamid hidroklorür toz kristalinin toz Kristal EPR spektrumu, b) Simüle edilmiş spektrum için a.i.y. değerleri $a_{CH} = 1.23$ mT, $a_N = 0.48$ mT ve çizgi genişliği $\Delta H = 0.90$ mT olarak alınmıştır.

4. SONUÇ

Gama ışınları ile ışınlanmış Glisinamid hidroklorür toz kristalinde elde edilen EPR spektrumları kaydedilmiştir. Spektrumların incelenmesi ve McKelvey simülasyon programı yardımı ile yapıda olduğu düşünülen $H_2N\dot{C}HCONH_2.HCl$ radikalın, $H_2NCH_2CONH_2.HCl$ molekülünden H_α atomunun kopması sonucu olduğu düşünülmüştür. EPR ölçümlerinde spektroskopik parametreler belirlenmiştir.

Elde edilen veriler, ışınlama sonrası molekül yapısında meydana gelen değişikliklerin detaylı olarak anlaşılmasına olanak sağlamış ve gama ışınlarının amino asit türevlerinde oluşturduğu serbest radikal yapılar hakkında önemli bilgiler sunmuştur. $GAHCl$ 'nin bu bağlamda model bir bileşik olarak kullanılması, hem radyasyona maruz kalan biyolojik sistemlerin anlaşılması hem de radyasyonla oluşan yapısal değişimlerin moleküler düzeyde araştırılması açısından değerli sonuçlar ortaya koymaktadır. Bu çalışmanın bulguları, gelecekte yapılacak olan radyobiyojik ve farmasötik uygulamalara ışık tutabilecek niteliktedir.

Sonuç olarak, canlıların yapı taşı olan amino asitler üzerinde gama ışının oluşturduğu yapısal bozukluğun cinsi ve yarı ömrünün belirlenmesi yaşayan canlılar için nedenli gerekli olduğu bu çalışmanın önemini göstermektedir.

5. KAYNAKLAR

- Aydın, M., Osmanoğlu, Y.E., 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.(2011) The identity and structure of free radicals in γ -irradiated amino acid derivatives, Bulgarian Chemical Communications, 43: 419 – 422.
- Başkan, M.H. (2008). EPR of γ -irradiated L-glutamine, glycyl-L-glutamine and N-glycyl-L-valine, Radiat. Eff. Defects Solids, 163: 35-39.
- 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 and Defects in Solids: 165: 938-943.
- Dicle, I.Y., Osmanoğlu, Ş., İpek, N. (2015). Electron paramagnetic resonance study of free radicals in γ -irradiated L-glutamine and L-Glutamine-t-butyl ester hydrochloride, Radiat. Eff. Defects Solids., 170: 65-71.
- McKelvey, R.D. (1987). Huckel MO theory and electron spin resonance in the spectroscopy Course, J. Chem. Educ. 64: 497-498.
- Osmanoğlu, Y. E., Sütçü, K. (2023). Electron Spin Resonance Study of Free Radicals Induced in Single Crystal of Oxcarbazepine, App. Magnet. Resonan, 54(8): 751-759.
- Osmanoğlu, Y.E. (2020). Simulation study of paramagnetic centers induced in glycine tertbutyl ester hydchkoride & L- α -alanine ethyl ester in solid state, El-Cezeri, J.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, Radiat. Eff. Defects Solids, 172: 621-628.
- Sütçü, K. (2024). A Study to Identify and Analyze the Radiosensitivity of 4-Piperidinecarboxylic Acid Using Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy, App. Magnet. Resonan, 1-13.
- 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., Osmanoğlu, Y. E., Osmanoğlu, Ş. (2014). Effect of Irradiation Dose, Microwave Power, and Storage Time on the Free Radical Concentration in γ -Irradiated Black Olive (*Olea europaea*) Seeds. International J. Scien. Res. Innovat. Techno. 1(3): 21-29.
- Şimşek, R., Gündüz, M.G., Şafak, C., Kökpınar, Ö., Aydın, M.(2017). Free radicals properties of some gamma-irradiated organic compounds, Bulgarian Chemical Communications, 49: 82 – 86.
- Zincircioğlu, S.B.,Canoruç,N., Osmanoğlu,Ş., Başkan, M.H., Dicle,I.Y., Aydın,M. (2006). Electron Paramagnetic Resonance of Some γ -Irradiated Amino Acid Derivatives, Radiat. Eff. Defects Solids., 61a: 577-582.