

Bazı Ağrı Kesici İlaçların Foton Etkileşim Parametrelerinin Hesaplanması

Saniye TEKEREK*

*Tıbbi Hizmetler ve Teknikler Bölümü, Sağlık Hizmetleri Meslek Yüksekokulu, Kahramanmaraş Sütçü İmam Üniversitesi, Kahramanmaraş, TÜRKİYE
*saniyetekerek@ksu.edu.tr

(Geliş/Received: 21/01/2021;

Kabul/Accepted: 10/02/2021)

Öz: Gama radyasyonunun madde ile etkileşiminin incelenmesi nükleer tıp, radyasyondan korunma ve radyasyon fiziği alanında önemli bir konudur. Gelişen teknoloji ile birlikte radyasyonun başta sağlık, sanayi ve enerji gibi alanlarda kullanılması artmıştır. Lineer soğurma katsayısı (μ), geçirgenlik ve gama ışını karakterize eden fiziksel bir niceliktir ve radyasyon perdeleme bakımından büyük öneme sahiptir. Bu çalışmada çeşitli enerjilerde Ketoprofen, Flurbiprofen, Etodolac, İbuprofen, Meloksikam, Diklofenak ve Aspirin adlı ağrı kesicilerin lineer soğurma katsayısı (μ) hesaplandı. Toplam elektronik tesir kesiti (σ_{te}) değerleri belirlendi. Çalışmada lineer soğurma katsayısının değeri WinXCOM data programı yardımıyla hesaplandı.

Anahtar kelimeler: Kütle soğurma katsayısı, Elektronik tesir kesiti, WinXCOM

Calculation of Photon Interaction Parameters of Some Pain Relief Drugs

Abstract: Study of the interaction of gamma radiations with matter is an important subject in the field of nuclear medicine, radiation protection and radiation physics. With the development of technology the using of radiation has increased in the area of medicine, industry and energy. The linear attenuation coefficient (μ) is the basic physical quantity characterizing penetration, gamma radiations and is of great importance in radiation shielding. In this study, the mass attenuation coefficient of painkillers named Ketoprofen, Flurbiprofen, Etodolac, Ibuprofen, Meloxicam, Diclofenac and Aspirin were calculated at various energies. total electronic cross-section (σ_{te}) were determined. The linear attenuation coefficient values were computed via with the help of the WinXCOM data program.

Key words: Linear attenuation coefficient, Electronic cross-section, WinXCOM

1. Giriş

Radyasyon kaynaklarının nükleer tıp ve radyoloji gibi insan sağlığını ilgilendiren alanlarda yoğun kullanımlarının artması ile radyasyonun maddeyle etkileşiminde önemli olan parametrelerin incelenmesi büyük önem kazanmıştır. Radyasyon doz hesaplamalarında, radyasyonun materyal içinde soğurulması bilgilerine ihtiyaç vardır. Radyasyonun madde ile etkileşiminin tanımlanmasında soğurma katsayısı önemli bir parametredir [1,2]. Bileşikler için karakteristik bir özellik olan soğurma katsayısı, ziraat, eczacılık, dozimetri, biyoloji, nükleer ve radyasyon fiziğinde oldukça önemli olan bir kavramdır. Radyasyon koruyucu malzemelerin soğurma özellikleri soğurma parametreleri ile açıklanabilmektedir. Bileşik malzemeler için bu katsayı hesaplanabilir [3]. Moleküller tesir kesiti, atomik tesir kesiti, etkin atom numarası ve etkin elektron yoğunluğu değerleri soğurma katsayısı değerleri kullanılarak hesaplanan büyüklüklerdir [4]. Lineer ve kütle soğurma katsayısının hesaplanması, nükleer fizikte, dozimetri, tıp alanında ve pek çok diğer radyasyon uygulamalarında ayrıca önemlidir. Lineer soğurma katsayısı materyal kalınlığını belirleme ve kontrol etmek için de kullanılmaktadır. Radyasyon malzemenin karakteristiğini değiştirebilir. Bu değişik istenmeyen sonuçlar doğurabileceği için birçok maddenin, alaşımın, bileşiğin ya da polimer malzemenin radyasyonla etkileşimini incelemek ve malzemede ne gibi değişikliklere yol açtığını bilmek çok önemlidir [5,6].

Element, bileşik veya karışım için toplam lineer ve kütle soğurma katsayıları WinXCom programı yardımıyla hesaplanabilmektedir. WinXCom karışım kuralına dayalı bir programdır. Bu kuralda materyal içindeki elementler birbirinden bağımsız kabul edilerek birbirleriyle etkileşimleri ihmal edilir [7].

Literatürde farklı enerjilerdeki ışın madde etkileşimlerinin soğurma parametreleri üzerindeki etkileri incelenmiştir. Radyasyon zırhlama açısından önemli olan parametreler Ni esaslı alaşımlar için Ni katkısına bağlı

olarak karışım kuralı kullanılarak 15,746-40,930 keV enerji aralığında hesaplanmalar yapılmıştır [8]. Temel aminoasitlerin 1 keV-100 GeV enerjileri arasındaki soğurma parametreleri teorik olarak hesaplanmıştır [9]. 280 ile 1115 keV enerji aralığında H-, C-, N- ve O tabanlı kompozit materyallerin soğurma katsayıları hesaplanmıştır [10]. Demir ve arkadaşları bazı vitaminlerin soğurma parametrelerini 30,82-1408,01 keV enerji aralığında hesaplamışlardır [11]. Biyomedikal öneme sahip bazı element ve bileşiklerin soğurma parametrelerini 59,54 keV enerjide incelemiştir [12].

Bu çalışmada çeşitli enerjilerde Ketoprofen, Flurbiprofen, Etodolak, İbuprofen, Meloksikam, Diklofenak ve Aspirin adlı ağrı kesicilerin WinXCOM programını kullanılarak lineer soğurma katsayısı (μ) hesaplandı.

2. Materyal ve Yöntem

Türkiyede ve dünya çapında çeşitli ağrıları gidermek amacıyla kullanılan maddeler Tablo 1’de listelenmiştir. Bu ağrı kesiciler tıp alanında farklı amaçlar içinde kullanıldığından dolayı yüksek enerjili ışınlarla verdikleri tepkileri incelemek gerekmektedir.

Tablo 1. Bu çalışmada kullanılan ağrı kesici aktif maddeleri.

Ketoprofen	$C_{16}H_{14}O_3$
Flurbiprofen	$C_{15}H_{13}FO_2$
Etodolak	$C_{17}H_{21}NO_3$
İbuprofen	$C_{13}H_{18}O_2$
Meloksikam	$C_{14}H_{13}N_3O_4S_2$
Diflofenak	$C_{14}H_{11}Cl_2NO_2$
Aspirin	$C_9H_8O_4$

Birden fazla elementten oluşan bileşik yapıya sahip malzemeler için karışım kuralı kullanılarak (μ/ρ) kütle soğurma katsayısı denklem (1) kullanılarak hesaplanabilir [13]. Bileşik yapıda bir materyal için toplam kütle soğurma katsayısı her bir elementin kütle soğurma katsayılarının karışım kuralına göre toplanmasıyla elde edilir.

$$\frac{\mu}{\rho} = \sum_i \omega_i \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_i \quad (1)$$

Denklem (1)’de ω_i atomik kesri, $(\mu/\rho)_i$ ise kütle soğurma katsayısını, ω_i terimi atomik kesri ifade eder.

Bileşik malzeme için her bir elemente ait kütle soğurma katsayısından yararlanarak elektronik tesir kesiti belirlenmiştir. Toplam elektronik tesir kesiti (σ_{te}) Formül (2) kullanılarak hesaplanmıştır [4].

$$\sigma_{te} = \frac{1}{N_A} \sum_i f_i \frac{A_i}{Z_i} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_i ; \quad f_i = \left(\frac{n_i}{\sum_i n_i} \right) \quad (2)$$

A_i bileşiği oluşturan i elementin atom ağırlığı, Z_i i elementinin atom numarası, f_i i elementinin bolluk kesri, n_i atom sayısıdır.

Yarı değer katmanı (HVL), malzeme ile etkileşime giren radyasyon şiddetini yarı yarıya azaltmak için gereken malzeme kalınlığını ifade etmektedir. Onda bir (1/10) değer katmanı (TVL) ise malzeme ile etkileşime giren ışının şiddetini 1/10’a düşürmek için gereken malzeme kalınlığıdır [14,15]. Denklem (3) ve (4) kullanılarak HVL ve TVL değerleri hesaplanmıştır.

$$HVL = \ln 2 / \mu \quad (3)$$

$$TVL = \ln 10 / \mu \quad (4)$$

Mfp parametresi, 1 (mean free path) Denklem (5) kullanılarak hesaplanmıştır.

$$\lambda=1/\mu$$

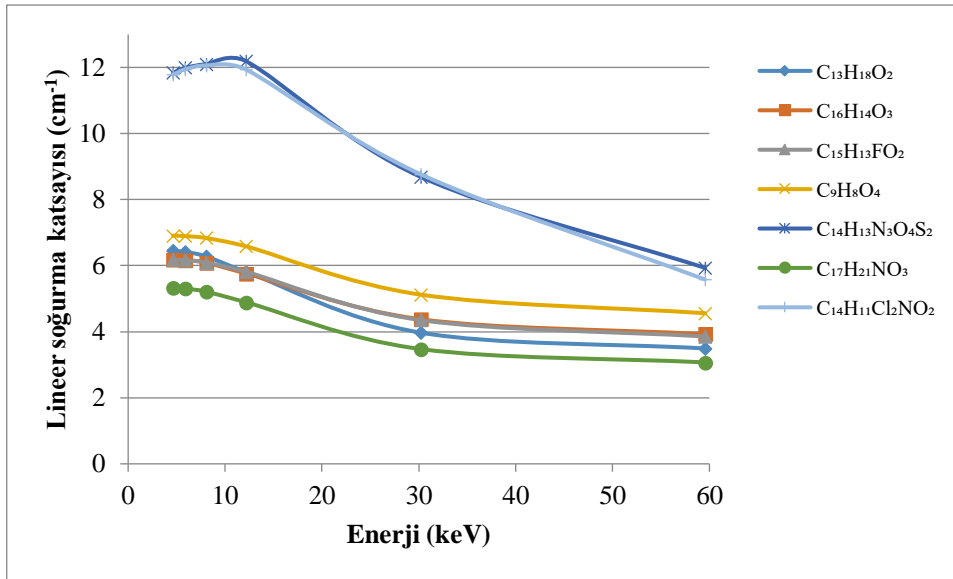
(5)

3. Bulgular ve Tartışma

WinXCOM programı kütle soğurma katsayılarını hesaplarken karışım kuralını dikkate alarak herhangi bir bileşik için birden fazla elementten oluşan malzemenin lineer soğurma katsayısını belirler [16]. Bileşiklerin belirtilen enerjilerde hesaplanan lineer soğurma katsayıları ve elektronik tesir kesiti değerleri Tablo 2-3'de verilmiştir. Hesaplanan değerlerin kıyaslama grafikleri Şekil 1-4'de gösterilmiştir. Grafiklerden de görüldüğü üzere $C_{13}H_{18}O_2$ İbuprofen adlı ağrı kesici bileşiğin en yüksek HVL değerine sahip olduğu gözlemlenmiştir. Etodolak adlı ağrı kesici $C_{17}H_{21}NO_3$ bileşiğin en yüksek TVL ve Mfp değerine sahip olduğu gözlemlenmiştir. Genel olarak bileşiklerde artan enerjiyle beraber lineer soğurma katsayı değerlerinde de bir azalış gözlenmektedir.

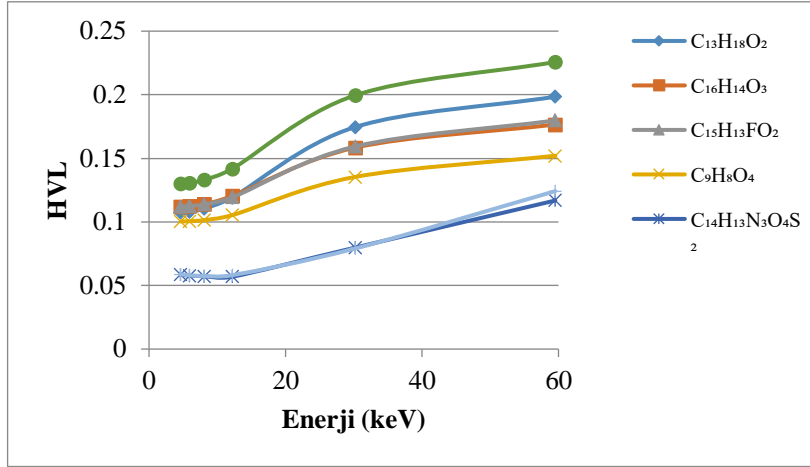
Tablo 2. Enerjiye (keV) bağlı olarak bileşiklere ait lineer soğurma katsayı μ (cm^{-1}) değerleri

	4,65	5,9	8,1	12,2	30,2	59,543
$C_{13}H_{18}O_2$	6,450801	6,412728	6,275871	5,810763	3,970911	3,493455
$C_{17}H_{21}NO_3$	5,328503	5,301893	5,21105	4,888973	3,474034	3,071207
$C_{16}H_{14}O_3$	6,186472	6,167304	6,088236	5,759984	4,376294	3,925846
$C_{15}H_{13}FO_2$	6,175862	6,161708	6,090938	5,809038	4,351176	3,855786
$C_9H_8O_4$	6,9076	6,8936	6,832	6,5814	5,1212	4,5598
$C_{14}H_{13}N_3O_4S_2$	11,83781	11,98782	12,09911	12,18299	8,686005	5,932614
$C_{14}H_{11}Cl_2NO_2$	11,78285	11,94456	12,05904	11,93025	8,764875	5,5809

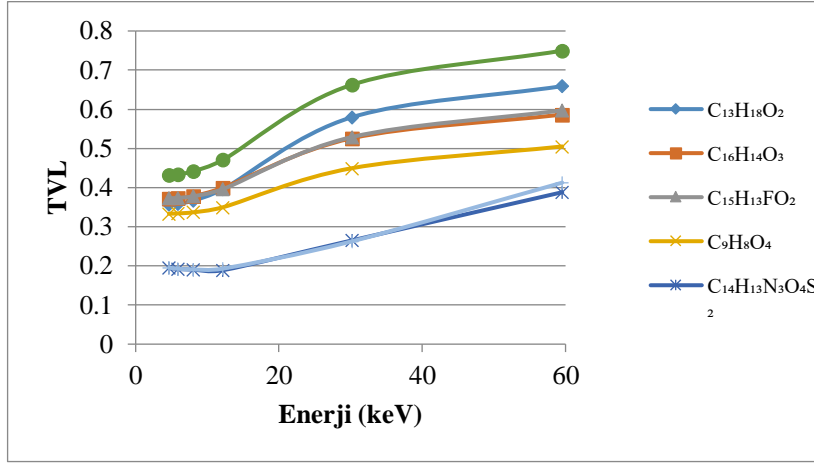


Şekil 1. Bileşiklerin enerjiye bağlı olarak lineer soğurma katsayısı (μ) değişim grafiği

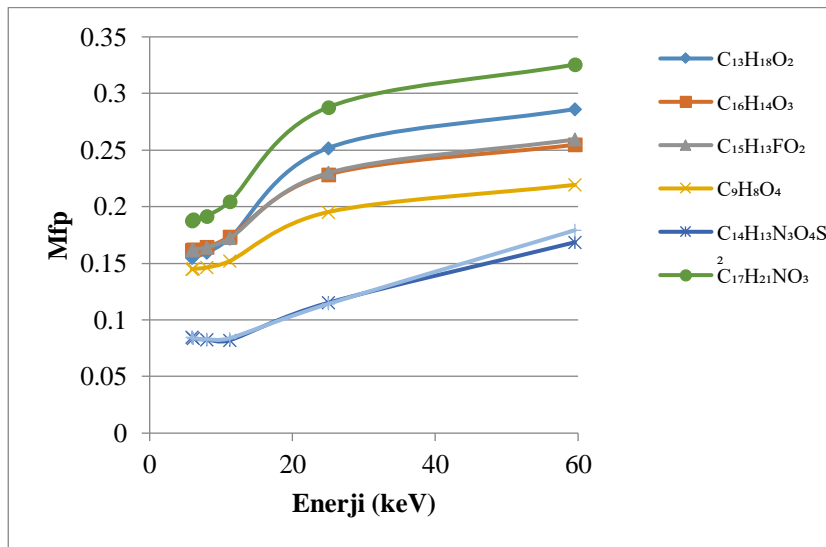
$C_{14}H_{13}N_3O_4S_2$ bileşiğine sahip olan Meloksikam adlı ağrı kesici 11,83781 değeri ile en yüksek lineer soğurma katsayısına sahip olduğu Tablo 2'de görülmektedir. Bileşik içindeki Cl varlığı ile Diklofenak ($C_{14}H_{11}Cl_2NO_2$) bileşiği en büyük lineer soğurma katsayısı değerine sahiptir. Aynı zamanda bileşiklere ait lineer soğurma katsayısı azalırken buna paralel olarak elektronik tesir kesiti değerlerinde de azalma gözlemlenmiştir. Çoklu elemente sahip bileşiklerde düşük enerjilerde pek fazla değişim gözlenmemekle beraber enerji artışına bağlı olarak soğurma parametrelerinin genelinde bir düşüş gözlenmiştir. Etodolak ($C_{17}H_{21}NO_3$) tüm enerji aralığında en düşük lineer soğurma katsayısı değerine sahip olan ağrı kesicidir. Genel olarak bileşiği oluşturan element sayısının artmasıyla lineer soğurma katsayısı değerleri artış göstermektedir.



Şekil 2. Bileşiklerin enerjiye göre yarı değer katman (HVL) değişimi



Şekil 3. Bileşiklerin enerjiye göre onda bir değer katman (TVL) değişimi



Şekil 4. Bileşiklerin enerjiye göre Mfp değişimi

Tablo 3. Farklı enerjilerde (keV) elektronik tesir kesiti ($\sigma_{te} \times 10^{-23}$) ($\text{cm}^2/\text{electron}$) değerleri.

	4,65	5,9	8,1	12,2	30,2	59,543
$\text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S}_2$	14,211	7,206	2,894	0,885	0,114	0,061
$\text{C}_{13}\text{H}_{18}\text{O}_2$	4,359	2,130	0,837	0,279	0,073	0,056
$\text{C}_{17}\text{H}_{21}\text{NO}_3$	4,966	2,424	0,948	0,310	0,075	0,056
$\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{O}_3$	5,670	2,763	1,075	0,346	0,077	0,057
$\text{C}_{15}\text{H}_{13}\text{FO}_2$	6,054	2,955	1,150	0,368	0,078	0,057
$\text{C}_9\text{H}_8\text{O}_4$	7,190	3,509	1,361	0,427	0,082	0,057
$\text{C}_{14}\text{H}_{11}\text{Cl}_2\text{NO}_2$	16,370	8,430	3,433	1,080	0,127	0,063

4. Sonuç

Bu çalışmada ağır kesicilere ait bazı bileşikler için çeşitli enerjilerde lineer soğurma katsayıları hesaplanmıştır. Lineer soğurma katsayısı (μ) değerleri kullanılarak yarı değer katmanı, onda bir değer katmanı, Mfp değerleri hesaplanmıştır. Çeşitli enerjilerde fotonun soğurulması incelenen malzemenin özelliklerine bağlı olarak gerçekleşir. Bu nedenle farklı enerjilerde ışın geçirgenlik verileri malzemenin soğurma ve zırlama özellikleri hakkında bilgi vermektedir. Ağır kesici bileşikler için incelenen enerjilerde radyasyon soğurma özellikleri daha iyi sonuçlar vermektedir. Elde edilen hesaplama sonuçlarından da görüldüğü gibi radyasyon enerjisi ile lineer soğurma katsayısı değişim göstermekte buda malzemelerin artan radyasyonla maddenin soğurma parametrelerinde değişime sebep olduğu anlaşılmaktadır. Elde edilen veriler yardımıyla TVL, HVL, Mfp parametreleri hesaplanmıştır. TVL, HVL değerlerinin birbiriyle ilişkili ve paralellik gösterdiği gözlemlenmiştir. Ağır kesici bileşiklerin μ , TVL, HVL ve Mfp değerlerinin bu çalışmada sunulan hesaplama sonuçları çeşitli tıbbi uygulamalarda ve alanlarda yol gösterici olarak referans alınabilir. Literatürde ağır kesici bileşiklere ait benzer bir çalışmaya rastlanmadığı için sonuçların kıyaslanması mümkün olmamıştır.

Bu çalışmadaki değerler kullanılarak bileşikler için kütle soğurma katsayısı (μ/ρ), moleküler tesir kesiti (σ_{tm}), atomik tesir kesiti (σ_a), etkin atom numarasının (Z_{eff}), etkin elektron yoğunluğu (N_{eff}) parametrelerinin hesaplanması yapılabilir. μ , TVL, HVL ve Mfp değerleri tıp alanında, onkoloji, molekül fiziğinde, nükleer fizik uygulamalarında kullanılmalarından dolayı radyasyon madde etkileşim değerleri hesaplanmıştır. Bu çalışmadan elde edilen veriler bu alanda çalışan araştırmacılara yol göstermesi açısından önemlidir. Bu değerler ışığında elde edilen veriler çeşitli alanlarda kullanılacağı gibi, yüksek enerjili ışınlarda radyasyondan korunmak amacıyla zırlama maddesi olarak kullanıma uygun olduğu düşünülmektedir.

Kaynaklar

- [1] Gerward, L., Guilbert, N., Jensen, K.B., Leving, H., 2001. X-ray absorption in matter Reengineering XCOM. Radiation Physics and Chemistry, 60, 23–24.
- [2] Chantler, C.T., 1995. Theoretical form factor, attenuation and scattering tabulation for Z=1-92 from E=1-10 eV to E=0.4-1.0 MeV. J. Phys. Chem. 24, 71-643.
- [3] Singh, V.P., Medhat, M.E., Badiger, N.M., Rahman, A.Z.M.S., 2015. Radiation shielding effectiveness of newly developed superconductors. Radiation Physics and Chemistry, 106, 175-183.
- [4] Singh, M.P., Sandhu, B.S., Singh B., 2007. Measurement of effective atomic number of composite materials using scattering of γ -rays. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 580, 50–53.
- [5] Singh, K., Singh, H., Sharma, V., Nathuram, R., Khanna, A., Kumar, R., Bhatti, S.S., Sahota, H.S., 2002. Gamma-ray attenuation coefficients in bismuth borate glasses. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, 194, 1-6.
- [6] Han, I., Demir, L., 2009. Determination of mass attenuation coefficients, effective atomic and electron numbers for Cr, Fe and Ni alloys at different energies. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B., 267, 3–8.
- [7] Kerur, B.R., Thontadarya, S. R., Hanumarah, B. 1994. Anomalous x-Ray Attenuation Coefficients Around the Absorption Edges Using Mn $K\alpha$, and Cu $K\alpha$ X-Rays. Appl. Radiat. 45 (2), 159-163.
- [8] İçelli, O., Erzeneoglu, S., Karahan, I.H., Çankaya, G., 2005. Effective atomic numbers for CoCuNi alloys using transmission experiments. Journal of Quant. & Radiative Transfer, 91, 485–91. .
- [9] Manohara, S.R., Hanagodimath, S.M., 2007. Studies on effective atomic numbers and electron densities of essential amino acids in the energy range 1 keV–100 GeV, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, 258, 321–328.

- [10] Kumar, P.S., Manjunathagura, V., Umesh, T.K., 2010. Effective atomic numbers of some H-, C-, N-, and O-based composite materials derived from differential incoherent scattering cross-sections. *Journal Physics*, 74 (4), 555-562.
- [11] Demir, D., Turşucu, A., 2012. Studies on mass attenuation coefficient, mass energy absorption coefficient and kerma of some vitamins. *Annals of Nuclear Energy*. 48, 17–20.
- [12] Hubbell, J.H., Seltzer, S.M., 1995. Tables of X-ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients 1 keV to 20 MeV for Elements Z=1 to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest, National Institute of Standards and Physics Laboratory, NISTIR, p5632.
- [13] Akça, B. and Erzeneoğlu, S. Z. 2014. The mass attenuation coefficients, electronic, atomic, and molecular cross sections, effective atomic numbers, and electron densities for compounds of some biomedically important elements at 59.5 keV, *Science and Technology of Nuclear Installations*.
- [14] Agar, O., et al., 2019. An extensive investigation on gamma ray shielding features of Pd/Ag-based alloys. *Nuclear Engineering and Technology*, 51(3), 853-859. Kavun et. al. / *Cumhuriyet Sci. J.*, Vol.40-4 (2019) 846-853.
- [15] Kavaz, E., et al., 2019. The Mass stopping power/projected range and nuclear shielding behaviors of barium bismuth borate glasses and influence of cerium oxide. *Ceramics International*, 45, (12).
- [16] Morabad, R.B., Kerur, B.R., 2010. Mass attenuation coefficients of X-rays in different medicinal plants. *Applied Radiation and Isotopes*. 68 (2), 271-274.