

## KISA ÖZET

5-Klorourasil ( $C_4H_3ClN_2O_2$ ) (5-Chloropyrimidine-2,4-dione; 5-Chloro-2,4-pyrimidinedione), önemli biyolojik aktivitesi olan bir moleküldür. Antibiyotik, antiviral ve antitümör etkileri dolayısıyla ilaç olarak kullanılmaktadır. RNA bileşenlerinden urasilin bir türevidir. Yapısal olarak da “thymine” molekülüne benzer, bu moleküldeki metil grubu yerine klor atomu girmiştir [1].

Diğer yandan montmorillonit kili, smektit türü şişebilen killere aittir. Birim hücresi dıştaki iki tetrahedral ve ortadaki oktahedral katmandan meydana gelir. Tabakalar net, negatif yüke sahiptir ve bu net negatif yük tabakalar arasında yer alan sulu yer değiştirebilir katyonlar tarafından dengelenir. Smektit türü killerin tabakaları arasında, polar ve polar olmayan pek çok molekülün girebildiği, bunların arasında ilaç özelliği bulunan moleküllerinde olduğu ve bu nedenle killerin ilaç taşıyıcısı olarak kullanılabildiği bilinmektedir [2,3,4].

Bu çalışmada 5-Klorourasil (5-CIU) molekülünün montmorillonit kili tarafından soğurulması ve etkileşmesi incelenmiştir. Çalışmanın amacı, biyolojik aktif 5-CIU molekülü ile kil matrisinin etkileşmesini incelemektir. Doğal montmorillonitin ve 5-Klorourasil ile muamele edilmiş montmorillonitin X-ışınları difraksiyon spektrumları kaydedilerek kilin tabakaları arası mesafe ölçülmüştür. Bu mesafe doğal montmorillonit kilinde 12.0 Å ve 5-CIU ile muamele edilmiş kilde 14.7 Å bulunmuştur. Tabakalar arası mesafenin artması 5-Klorourasil molekülünün kilin tabakaları arasında, tek tabakalı düzenleme ile girdiğini gösterir. Çalışmada katı fazda 5-CIU mikrokristalinin IR spektrumu ile 5-CIU ile muamele edilmiş montmorillonit kilinin ve doğal montmorillonitin IR spektrumları karşılaştırılarak 5-CIU ile kil matrisi arasındaki etkileşme incelenmiştir. IR spektroskopik inceleme 5-CIU moleküllerinin oksijen uçlarında Lewis asit merkezlerine, doğrudan veya su köprüleri üzerinden bağlandığını göstermiştir[3,4].

## ABSTRACT

5-Chlorouracil ( $C_4H_3ClN_2O_2$ ) (5-Chloropyrimidine-2,4-dione; 5-Chloro-2,4-pyrimidinedione), exhibits significant biological activity. It is used as a drug due to its antibacterial, antiviral and antitumor activities. It is an uracil derivative and structural analogous of thymine, by substituting chlorine atom to methyl group [1].

On the other hand montmorillonite belongs to smectite group of clays. It has layered structure which are composed of two tetrahedral sheets sandwiching a central octahedral sheet. Each layer has a small net negative charge due to isomorphous substitution of ions in the framework. The charge is compensated by interlayer hydrated cations, which are known as exchangeable cations. It is well known that wide variety of organic molecules can intercalate between the interlayer regions of expandable clays. Clay-organic composites have been recognized as one of the most promising material as drug delivering systems [3,4].

In this study the adsorption of 5-chlorouracil by natural montmorillonite from Anatolia has been investigated using FT-IR spectrometry. The aim of this study is to investigate the interaction of biological active 5-chlorouracil molecule with the clay framework. Treatment of natural montmorillonite with 5-chlorouracil resulted in an increase in the basal spacing indicating formation of intercalate. The basal spacing of 5-chlorouracil treated montmorillonite is 14,7 Å. The result, compared with the value of 12,0 Å for the basal spacing of untreated air-dried clay, indicates that 5-chlorouracil molecules intercalate into the interlayers of montmorillonite with a monolayer arrangement. IR spectroscopic investigation showed that adsorbed 5-CIU molecules coordinate to Lewis acidic centers through oxygen centers, directly or indirectly through water molecules [3,4].