



**Research Article / Araştırma Makalesi**

**THE INVESTIGATION THERMODYNAMICAL PROPERTIES OF  
CARNOSIC ACID AND CARNASOL IN ROSEMARY  
(*ROSMARINUSOFFICINALIS*) BY USING HF (HARTRE-FOCK) AS  
THEORETICAL**

**FAİK GÖKALP\***

*Kırıkkale Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, İlköğretim Bölümü, Fen Bilgisi Eğitimi ABD, Yahşihan-KIRIKKALE*

**Received/Geliş: 23.01.2015 Revised/Düzelme: 14.06.2015 Accepted/Kabul: 15.06.2015**

**ABSTRACT**

The antioxidants effects of Carnasol and Carnosic acid from Rosemary are calculated as theoretical by using HF; The result of the calculation obtained, Carnosic acid is more stable and eager to give reaction than carnasol.

**Keywords:** Carnosol, carnosic acid and HF (Hartree-Fock).

**BİBERİYEDE (*ROSMARINUSOFFICINALIS*) BULUNAN KARNOSİK ASİT VE KARNASOLUN  
TERMODİNAMİKSEL YAPISININ HF (HARTRE-FOCK) İLE TEORİKSEL OLARAK  
İNCELENMESİ**

**ÖZ**

Biberiyeden elde edilen Karnosik ve Karnosik asitin antioksidan etkileri teoriksel olarak HF kullanarak hesaplandığında Karnosikasitin daha kararlı ve reaksiyon vermeye istekli olduğu elde edilen verilerden anlaşılmaktadır.

**Anahtar Sözcükler:** Karnosik, karnosik asitin ve HF (Hartre-fock).

**1. GİRİŞ**

Halk arasında kuşdili olarak bilinen küçük iğne uçlu, 2 metreye kadar boyulanabilen her zaman yeşil kalabilen ve güçlü bir aromaya sahip çalı görünümlü olan aromatik bir bitkidir. İlbahar ve yaz aylarında açan çiçekleri beyaz, açık mavi ve mavi, morumsu renklidir. Yapraklarının tadı acımsı baharlıdır ve yapraklarının ekstrakte edilmsiyle elde edilen uçucu yağından yararlanılır. Antioksidan özelliği, yapısında bulunan karnosol, karnosik asit ve rosmarinik asitten kaynaklanmaktadır. Karnosik asitin karnosoldan üçkat, BHT ve BHA'dan ise yedi kat fazla olduğu bildirilmiştir [1,2,3].

\* e-mail/e-ileti: akgokalp@gmail.com, tel: (318) 357 42 42 / 1316

Türkiyede yetiştirilen aromatik bitkilerin antioksidan etkilerinin ayçiçeği yağında incelendiği bir çalışmada; [4] en güçlü antioksidan etkiye sahip biberiye bitkisinin olduğu, bunu sırasıyla adaçayı, sumak, kekik, mercanköşk ve zahterin izlediği görülmüş. Ayrıca sentetik antioksidanların zararlı olduğundan birçok ülkede kullanımının yasaklandığı bazılarında ise sınırlandırıldığı ve tokoferollerin ise sentetiklere nispeten kısa ömürlü olmasından kullanımında sıkıntılar olduğundan bahsedilmiş; güçlü aromatik antioksidanlardan biberiyenin renksiz, kokusuz, tatsız formları bazı ülkelerde ticari olarak üretilmektedir [4]. Oksidatif etki ile ilgili olarak; soğan suyu ve biberiye ekstraktının etkisinin araştırıldığı bir çalışmada; biberiye ekstraktının muhafaza süresince antioksidatif etki gösterdiği, soğansuyunun ise oksidasyonu geciktirdiği tespit edilmiştir.[5,12].

Yine, 15 farklı baharat türünün sucuklara katılarak denendiği bir çalışmada en önemli antioksidan etkiyi adaçayı ve biberiyenin gösterdiği tespit edilmiştir. Trolox ve askorbik asit gibi polar antioksidanlar yağ-su karışımlarında nonpolar olan yağ üzerinde toplanarak oksidasyonu engeller [6]. Biberiyenin antioksidan etkisinin; öncelikli olarak türe, hasat zamanına, işlemin tipine ve en önemli faktörlerden olan gelişme ortamının çevresel ve ekolojik yapısına bağlı olduğu bildirilmiştir [7,12].

Biberiyenin yapısında bulunan ve ekstyrahte edilerek elde edilen karnasol ve karnosik asit kanser tedavisinde tümör gelişimini engelleyen önemli etken maddelerdendir [8]. Karnosik asit ile farelerde yapılan deneylerde gastriti önleyerek mideyi korumada etkili olduğu gözlenmiştir [9].

Karnosik asit ilşe yapılan diğer bir çalışmada; B16F10 melanoma tümör hücrelerinin metastazik yayılımını engellemesinde önemli bir molekül olduğu tespit edilmiştir [10]. Karnasol GSH hormon düzeyini artırarak, hidrojenperoksit ve alkolün zararlı etkilerine karşı koruyucu etki sağladığı tespit edilmiştir.[11].

## 2. TARTIŞMA VE SONUÇ

Biberiyenin yaprağından elde edilen Karnosik Asit ve Karnasolun HF ile yapılan hesaplamalarından çizelge 1 ve çizelge 2 deki sonuçlara ulaşılmıştır.

**Çizelge 1.** KarnasolunHF ile hesaplanan  $\Delta G$ , HOMO, LUMO,  $\Delta(\text{HOMO-LUMO})$  ve Dipol Moment değerleri

HF	$\Delta G$ (Hartree)	HOMO	LUMO	$\Delta(\text{HOMO-LUMO})$	Dipol Moment
Karnasol	-1058.7241958	- 0.22873	0.2511 6	0.47989	5.0137

**Çizelge 2.** Karnosik AsitHF ile hesaplanan  $\Delta G$ , HOMO, LUMO,  $\Delta(\text{HOMO-LUMO})$  ve Dipol Moment değerleri

HF	$\Delta G$ (Hartree)	HOMO	LUMO	$\Delta(\text{HOMO-LUMO})$	Dipol Moment
Karnosik Asit	-1059.8617596	- 0.21600	0.5013 5	0.71735	2.3476

Bu sonuçlara baktığımızda; Karnosik Asit  $\Delta(\text{HOMO-LUMO})$  farkı 0.71735 ve Karnasol ise 0.47989 Karnosik asit daha kararlı ve Karnosik asitin serbest enerji değeri -1059.8617596 Hartree ile Karnasoldan 1.1375638 Hartree daha fazla olduğu dolayısıyla reaksiyon vermeye daha istekli olduğu söylenebilir. Bu elde ettiğimiz sonuçlardan; Karnosik asit antioksidan olarak daha etkilidir diyebiliriz.

## REFERENCES / KAYNAKLAR

- [1] Frankel, E.N.,Huang S., Aeschbach, R.and Prior, E., 1996, Antioxidant Activity of a Rosemary Extract and Its Constituents, Carnosic Acid, Carnosol, and Rosmarinic Acid, in Bulk Oil and Oil-in-Water Emulsion, J. Agric. Food Chem.,44, 131-135.
- [2] Richheimer, S.L., Bernart, M.W., King, G.A., Kent, M.C., Bailey, D.T., 1996, Antioxidantactivity of lipid-soluble phenolic diterpenes from rosemary. Journal AOCS. 73:507-514.
- [3] 2000 biberiye.com – powered by webhavuzu a.s. <http://www.biberiye.com/tanim.htm>[accessed August 17,2015].
- [4] Akgül, A., Ayar, A. 1993. Yerli baharatların antioksidan etkileri. Doğa-TR. J. of Agriculture and Forestry. 17:1061-1068. 5. Serdaroğlu M, Felekoğlu E. 2005. Effects of using rosemary extract and onion juice on oxidative stability of sardine (*Sardina pilchardus*) mince. J. Food Quality 28, 109–120.
- [6] Yanishlieva, N. V., Marinova, E., Pokorny, J., Natural antioxidants from herbs and spices. Eur. J. Lipid Sci. Technol. 2006, 108, 776–793.
- [7] Kırıcı, S. ve İnan, M., 2002, Effect of Different Harvesting Time on the Essential Oil Content of Rosemary (*Rosmarinusofficinalis* L.) in the Çukurova Conditions. In Proceedings of the Workshop on Agricultural and Quality Aspects of Medicinal and Aromatic Plants.
- [8] Lopez-Jimenez,A.,Garcia-Caballero,M., Medina,M.A., Quesada,A.R., 2013, Anti-angiogenic properties of carnosol and carnosic acid, two major dietary compounds from rosemary, Eur. J. Nutr., 52:85–95.
- [9] Theoduloz, C., Pertino, M.W. andSchmeda-Hirschmann, G., 2014,Gastroprotective Mechanisms of Action of SemisyntheticCarnosicAcidDerivatives in Human Cells, Molecules, 19, 581-594.
- [10] Park, S.Y., Song, H., Sung, M.K., Young-Hee, K., Won, K., Han, L.J., Park, Y., 2014, Carnosic Acid Inhibits the Epithelial-Mesen chymal Transitionin B16F10 Melanoma Cells: A Possible Mechanism for the Inhibition of Cell Migration, Int. J. Mol. Sci., 15, 12698-12713.
- [11] Chien-chung C., Hui-ling C., Chia-wen H., Yi-ling Y., Being-sun W., 2011, Upregulation of NF-E2-related factor-2-dependent glutathione by carnosol provokes a cytoprotective response and enhances cell survival, Acta Pharmacologica Sinica, 32: 62–69.
- [12] Çoban, Ö.E., Patır, B., 2010, Antioksidan Etkili Bazı Bitki ve Baharatların Gıdalarda Kullanımı, Electronic Journal of Food Technologies, 5(2), (7-19).