Biberiyede Karnosolun Su Ve Etanol İle Etkileşiminin Teoeriksel Olarak İncelenmesi

*[1]Faik GÖKALP

[1]Kırıkkale University, Faculty of Education, Department Of PrimaryEducation, ScienceEducationDivision,Yahşihan/Kırıkkale, Turkey, akgokalp@gmail.com

Özet

Biberiyeden elde edilen ve birçok kanser türünde etkili olan karnasolun su ve etanol ile etkileşimi teoriksel olarak Hartree-fock (HF) kullanarak hesaplandığında; Karnasolun-etanol etkileşiminin daha fazla olduğu ve daha kararlı yapı oluşturduğu tespit edilmiştir. Sonuç olarak karnasolun etanolde daha iyi çözündüğünü belirtebiliriz.

Anahtar Kelimeler: Biberiye,Karnasol,Su,Etanol,HF

Abstract

Carnosol, derived from Rosemary, is effective in many types of cancers and as calculated its interaction with ethanol and water by using Hartree-Fock as theoretically; The interaction of carnosol-ethanol is more than the other and It has been also identified of having more stable structure than carnosol-water. As a result, we can specify the solubility of carnosol with ethanol is better than the other one.

Key words: Rosemary, carnosol, water, ethanol, HF[1]

1. Giriş

Küçük iğne uçlu, yapraklı bu bitki *Labiataem* ailesindendir. Biberiye Avrupa'da geçmişten beri tonik ve uyarıcı olarak kullanılmaktadır. Eski Yunanlıların hafızayı kuvvetlendirmek ve konsantrasyonu artırmak amacıyla, bilginlerin başlarına biberiye çelenkleri taktığı

*Corresponding author: Address: Kırıkkale University, Faculty of Education, Department Of PrimaryEducation, ScienceEducationDivision,Yahşihan/Kırıkkale, Turkey, akgokalp@gmail.com

bilinmektedir. Baharatlar ve şifalı bitkiler arasında en fazla kendine yer edinenler biberiye ve ada çayıdır [1]. Ada çayı ve biberiye ekstraktlarının süperoksit bağlama etkisinin troloks (sentetik bir antioksidan)' a kıyasla 15–20 kat daha fazla olduğu tespit edilmiştir [2].

Yapılan bir çalışmada; biberiye ve adaçayının domuz yağı üzerinden yüksek aktiviteye sahip olduğu bulunmuştur [4]. Ayrıca biberiye ve adaçayı, karanfile göre yağ ve su emülsiyonlarında daha yüksek verim göstermiştir. Antioksidan etkiye sağduyulu bileşiklerin izolasyonu ve tanımlanması için deneysel çalışmalar yapılmış ve biberiye ile adaçayının daha yüksek antioksidan aktivite gösterdiği ortaya çıkmıştır. Çalışmalar sonucu karnosol ve karnosik asidin biberiyede birlikte var olduğu bulunmuştur. Antioksidan özelliği yapısında bulunan karnosol, karnosik asit ve rosmarinik asitten kaynaklanmaktadır [1,3].Yünlü kumaşın biberiye posası ve sitrik asit karışımı ile boyanıp, beş yıkama sonunda antibakteriyel etkiye sahip ürün elde edilmiştir [5].

Karnasol ile insan meme, yumurtalık, ve bağırsak tümör hücre çizgileri hücre canlılığı azalmış ve fibronektin ve süspansiyon içinde kanser hücrelerinin büyümesi üzerinde kanser hücre yarışmasını inhibe ettiği tespit edilmiştir. Karnasol ayrıca, yumurtalık kanseri hücrelerinde, EGF-bağlı epitelial mezenkimal geçişi inhibe ettiği görülmüştür [6]. Diğer yandan karnasol ağrı tedavisin de kullanılmakla birlikte kolon,göğüs,prostat,deri ve lösemiye karşı oldukça etkili bir madde olduğu tespit edilmiştir [7,8].

2. Materyal ve Metod

Bu çalışmada,biberiyede bulunan karnasolun; etanol ve su ile etkileşimi HF yöntemi ve Polarize fonksiyonları içeren 6-31G (d,p) temel kümesi kullanıldı. Bu yöntemler ve temel küme kullanılarak bileşiklerin tam optimize geometrik yapıları belirlendi. Hesaplamalarda GAUSSIAN 09W paket programından yararlanılmıştır.

Frekans hesaplamaları sonucu, bileşiklerin her biri için, E0 + $G_{corr,}$ μ (dipol moment), HOMO ve LUMO değerleri elde edilmiştir. Elde edilen bu değerlerden yararlanılarak her bileşiğe ait serbest enerji değişimleri (ΔG) hesaplanmıştır.

3. Bulgular

Biberiyenin yaprağından elde edilen Karnasolun, su ve etanol ile etkileşimi Gaussian 09 programında HF ile yapılan hesaplamalarından Tablo 1, Tablo 2 ve Tablo 3 deki sonuçlara ulaşılmıştır.

HF	ΔG (Hartree)	HOMO	LUMO	Δ(HOMO-LUMO)	Dipol Moment
Karnasol-Su	-1133.6919538	-0.21816	0.25962	-0,47778	6.5211

Tablo1 Karnasol-suetkileşiminin HF ile hesaplanan ΔG, HOMO, LUMO, Δ(HOMO-LUMO) ve Dipol Moment değerleri

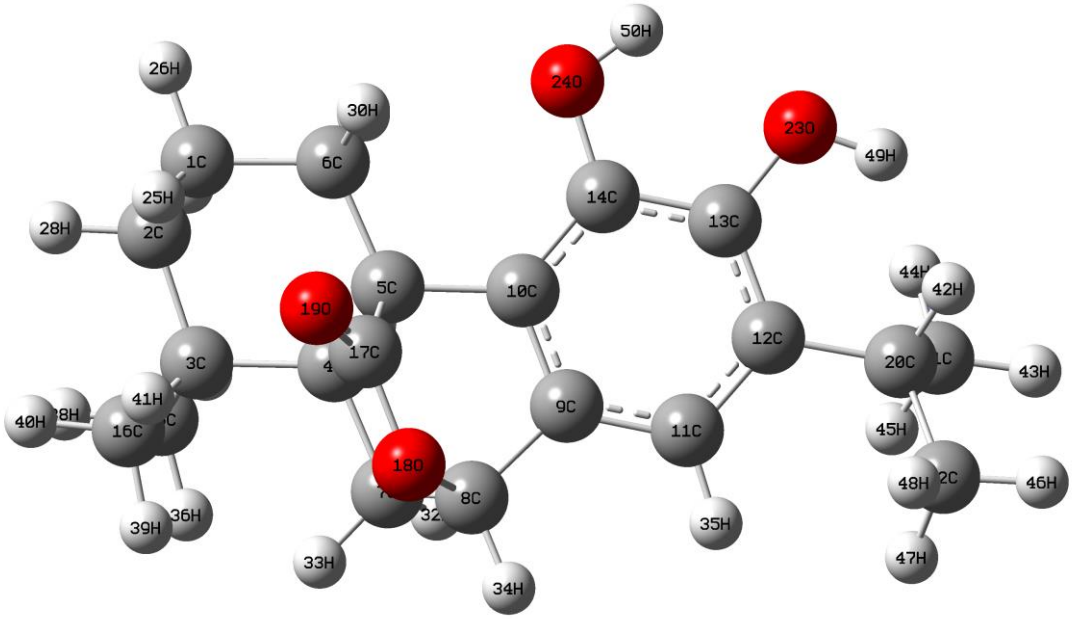
HF	ΔG (Hartree)	HOMO	LUMO	Δ(HOMO-LUMO)	Dipol Moment
Karnasol-Etanol	-1172.273438	-0.22142	0.25809	-0,47951	3.8381

Tablo2 Karnasol-etanol etkileşimininHF ile hesaplanan ΔG, HOMO, LUMO, Δ(HOMO-LUMO) ve Dipol Moment değerleri

HF	ΔG (Hartree)	HOMO	LUMO	Δ(HOMO-LUMO)	Dipol Moment
Karnasol	-1058.7241958	-0.22873	0.25116	-0.47989	5.0137
Etanol	-154,047721	-0,43869	0,08822	-0,52691	2,3456
Su	-76,446564	-0,50245	0,16040	-0,66285	2,5875

Tablo3 Karnasol,etanol ve suyun HF ile hesaplanan ΔG, HOMO, LUMO, Δ(HOMO-LUMO) ve Dipol Moment değerleri

Karnasol'un molekül şekli, Şekil 1 de verilmiştir.



Şekil 1 Karnasol'un molekül şekli

4. Tartışma ve Sonuç

Bu sonuçlara baktığımızda; Karnosol-su etkileşiminin Δ(HOMO-LUMO) farkı;-0,47778 ve Karnasol-etanol ise -0,47951. Karnosol-etanol daha kararlı olduğunu görmekteyiz. Karnosol-su etkileşiminin serbest enerji değeri;-1133.69195 Hartree ile Karnasol-etanol ise -1172.27344 Hartree dir. Karnasol-su etkileşimi ile Karnasol ile suyun toplamları farkına baktığımızda; -1.47881 Hartree ve Karnasol-etanol etkileşimi ile Karnasol ile etanolün toplamları farkına baktığımızda; -40.49910 Hartreedir.

Biberiyenin yaprağından elde edilen ve antikanser antioksidan özellik gösterdiği literatür bilgilerinde belitilen karnasolun, su ve etanol ile etkileşimiyle ilgili ; Karnasolun-etanol etkileşiminin daha fazla olduğu ve daha kararlı yapı oluşturduğu tespit edilmiştir. Karnasolun etanol ile etkileşimi daha fazladır yani etanolde daha iyi çözünür dolayısıyla canlı metabolizmasında bütün doku ve hücrelere ulaşımının ,teoriksel verilere dayanarak, daha etkin olduğu tespit edilmiştir.

Kaynaklar

[1] Frankel E.N, Huang S, Aeschbach R and Prior E. Antioxidant Activity of a Rosemary Extract and Its Constituents, CarnosicAcid, Carnosol, and Rosmarinic Acid, in Bulk Oil and Oil-in-Water Emulsion J. Agric. FoodChem. 1996, 44, 131-135.

[2] Akar E, Bulut MO, Bazı tekstil boya bitkilerinin antibakteriyal özellikleri ve aktivitesi için kullanılan test yöntemleri, Jornal Of Technical Sciences, 2013,3-2.

[3] Richheimer S.L, Bernart MW, King GA, Kent MC, Bailey DT, Antioxidant Activity of Lipid-Soluble Phenolic Diterpenes from Rosemary, Journal AOCS. 1996, 73:507-514.

[4] Yanishlieva NV, Marinova EM, Stabilisation of Edible OilsWith Natural Antioxidants, Eur. Jurnal Lipid Science Technol. 2001, 103, 752-76

[5] Bulut O,Akbulut Y, Kılık, Ç, Theantibacterialwoolenfabricsprovidedfrompulpplants,International Istanbul Textile Conrees 2013 Innovative and functional textiles,İstanbul.

[6] Vergara D, Simeone P, Bettini S, Tinelli A, Valli L, Storelli C, Leo S, Santino A, Maffia M,Antitumor activity of the dietary diterpene carnosol against a panel of human cancer cell lines, Food Funct., 2014,5, 1261-1269

[7] Zhai C, Liuq, Zhang Y, Wang S, Zhang Y, Li S, Qiao Y, Identification of Natural Compound Carnosol as a Novel TRPA1 Receptor Agonist, *Molecules* **2014**, *19*(11), 18733-18746.

[8] Katyal R, Prashar D, Kumar S, Pharmaco-Economical And Nutritional Overview Of Rosemary, **,** Actapharmica 2015, 2(2) 84-87.