

ESTUDO DA REATIVIDADE QUÍMICA DO AJOENE VIA DFT: ANÁLISE DE DUAS CONFORMAÇÕES

**João Pedro de Oliveira Nunes^{1,2}, Maxwell Pereira Oliveira¹, Paulo Alliprandini Filho³,
Max Pereira Gonçalves³, Welyson Tiano dos Santos Ramos³**

¹*Graduando em Engenharia Física, Instituto de Engenharia, Ciência e Tecnologia, Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Janaúba, MG, Brasil (joao.nunes@ufvjm.edu.br)*

²*Instituto de Engenharia, Ciência e Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Química/PPGQ, Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Janaúba, MG, Brasil.*

³*Docente no Instituto de Engenharia, Ciência e Tecnologia, Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Janaúba, MG, Brasil (welyson.ramos@ufvjm.edu.br)*

Resumo: Neste trabalho, realizamos um estudo computacional via DFT para investigar a reatividade química de duas conformações da molécula de ajoene, visando seu uso como antifúngico. A molécula apresenta alta assimetria na distribuição de carga, momento dipolar elétrico elevado, e sítios propícios para ataques nucleofílicos, eletrofílicos e radicalares nos átomos de enxofre e oxigênio, sendo uma molécula com forte caráter eletrofílico. Esses fatores indicam potencial para interação com alvos biológicos.

Palavras-chave: Ajoene; DFT; *Allium Sativum*; simulação de molécula orgânica; alho

INTRODUÇÃO

A agricultura brasileira enfrenta todos os anos grandes perdas econômicas devido a diversas infecções fúngicas que afetam culturas essenciais. Entre os principais agentes patogênicos estão fungos como *Mycosphaerella musicola*, causador da sigatoka amarela na banana; *Colletotrichum gloeosporioides*, responsável pela antracnose na mesma cultura; e *Aspergillus ochraceus*, que contamina cereais e produz micotoxinas nefrotóxicas e cancerígenas, impactando também a saúde pública (Embrapa, 2025). Diante desse cenário, a busca por antifúngicos naturais tem ganhado destaque, sobretudo pela crescente preocupação com os efeitos ambientais adversos dos fungicidas sintéticos. Os compostos naturais são tradicionalmente utilizados no combate a fungos e outras doenças, com eficácia comprovada e menor impacto ecológico (YADAV; TRIVEDI; BHATT, 2015). Consequentemente, há um interesse crescente

na descoberta de substâncias naturais que possam atuar como agentes terapêuticos ou potencializadores de tratamentos antifúngicos convencionais (FREITAS; OLIVEIRA, 2018).

Neste contexto, o alho (gênero *Allium*) chama atenção pela riqueza em compostos organossulfurados, reconhecidos por suas propriedades antimicrobianas e antifúngicas (GRUHLKE et al., 2016). Plantas são fontes promissoras de fitoquímicos bioativos, incluindo glicosídeos, alcaloides, saponinas, esteróides, flavonóides, taninos e terpenóides, que apresentam efeitos farmacológicos variados (EL-SABER BATIHA et al., 2020). As espécies de *Allium* possuem compostos contendo enxofre, como a aliina, precursor da alicina, um potente agente antimicrobiano que protege a planta contra invasores microbianos e pragas (MAIDMENT; DEMBANY; WATTS, 2001).

O alho é amplamente valorizado não apenas pela atividade antimicrobiana, mas também pelas suas

propriedades anticancerígenas, antitrombóticas, antivirais, antifúngicas e antioxidantes atribuídas aos seus compostos organossulfurados (Yoo et al., 2014). Contudo, a alicina, componente principal do alho, é altamente instável, limitando sua aplicação comercial. Por outro lado, um derivado mais estável, o ajoene (C₉H₁₄OS₃), tem se destacado por sua estabilidade química e significativa atividade biológica (Silva et al., 2018). Sua estrutura molecular está ilustrada na Figura 1, onde são mostradas duas conformações.

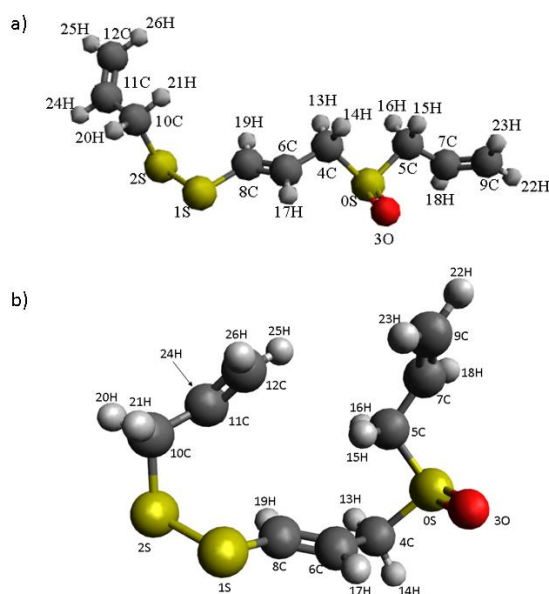


Figura 1. Conformações da molécula de Ajoene avaliada neste trabalho. (a) Conf. 1; (b) Conf. 2.

O ajoene é composto por dois isômeros geométricos, a forma trans (E) e a forma cis (Z). O isômero Z apresenta maior bioatividade, enquanto o isômero E é mais estável durante o armazenamento (Yoo et al., 2014). Além dessas formas isoméricas, a molécula pode adotar diferentes conformêros. Estima-se cerca de dez conformações possíveis, dependendo das rotações em torno das ligações simples. Essa substância pode ser obtida pela incubação da polpa de alho em solventes polares, como água, e também é encontrada em extratos comerciais de alho macerado em óleo (Yoo et al., 2014).

No entanto, estudos detalhados sobre a conformação do ajoene, especialmente por métodos computacionais, ainda são limitados. Assim, neste trabalho, é apresentada uma investigação computacional da reatividade química de duas conformações do ajoene, com o objetivo de compreender seu potencial como composto bioativo de interesse antifúngico.

MATERIAL E MÉTODOS

As coordenadas atômicas da molécula do Ajoene foram obtidas no banco de dados Pubchem, CID 5386591. Para avaliar a estrutura do Ajoene e sua reatividade química foi utilizado a teoria do funcional de densidade (DFT- *Density Functional Theory*), com o funcional híbrido B3LYP, função de base def2-TZVPP e base auxiliar def2/J. As simulações foram realizadas através do software Orca (Neese, 2018). As estruturas foram otimizadas até o mínimo de energia e para confirmar que as estruturas otimizadas estavam em seu mínimo de energia, cálculos de frequência foram empregados e nenhuma frequência imaginária foi encontrada. Os orbitais HOMO (HOMO- *Highest occupied molecular orbital*), LUMO (LUMO – *Lowest unoccupied molecular orbital*), suas energias e o Gap de energia foram calculados. A visualização dos orbitais foi obtida através do software Avogadro. Cálculos da distribuição de carga na molécula foram executados por meio da população de Mulliken (Botelho *et al.*, 2021), e o mapa de potencial eletrostático foi extraído com auxílio da linguagem Python e o software Chimera. O momento de dipolo elétrico da molécula também foi calculado.

Para quantificar a reatividade química dos conformêros estudados, foram calculados parâmetros químicos como eletronegatividade (χ), potencial químico (μ) e dureza química (η), sendo os parâmetros expressos pelas seguintes equações (Pearson, 1988):

$$\chi = \frac{1}{2}(IE + EA), \quad (1)$$

$$\mu = -\frac{1}{2}(IE + EA), \quad (2)$$

$$\eta = \frac{1}{2}(IE - EA), \quad (3)$$

Estes cálculos baseiam-se no teorema de Koopmans (1934), que estabelece que os valores negativos do HOMO e LUMO correspondem à energia de ionização (IE) e à afinidade eletrônica (EA), respectivamente.

Ainda, foram calculadas a maciez química (S), obtida a partir do inverso da dureza química (Kaya *et al.*, 2016), o poder de eletrofilicidade (ω), conforme a definição dada por Parr *et al.* (1999), e a capacidade da molécula de doar elétrons (ΔN), dada pela fração de elétrons transferidos (Khafira *et al.*, 2022), sendo as equações conforme a seguir:

$$S = \frac{1}{\eta}, \quad (4)$$

$$\omega = \frac{\mu^2}{2\eta}, \quad (5)$$

$$\Delta N = \frac{\chi}{2\eta}. \quad (6)$$

Os índices de reatividade de Fukui foram calculados, a partir da diferença finita da análise populacional de Mulliken (Bassey, 2014). Para medir a reatividade química em relação aos ataques nucleofílicos (f_k^+), ataque eletrofílicos (f_k^-) e ataque radicalar (f_k^0), sendo

$$f + k = qk(N + 1) - qk(N) \quad (7)$$

$$f - k = qk(N) - qk(N - 1) \quad (8)$$

$$f^0k = [qk(N + 1) - qk(N - 1)]/2 \quad (9)$$

onde $qk(N + 1)$, $qk(N)$ e $qk(N - 1)$ representam as densidades eletrônicas em um átomo k correspondente a $N + 1$ (ânion com carga única), N (neutro molécula) e sistemas de elétrons $N - 1$ (cátion com uma única carga), respectivamente. De modo geral, os índices de Fukui mensuram como uma perturbação externa afeta o potencial químico (μ) de um sistema (Duarte, 2001).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Orbitais Moleculares de Fronteira

Orbitais moleculares de fronteira, HOMO e LUMO, mostrado na Figura 2, desempenham um papel central na descrição de características eletrônicas e reatividade química (Ouaket et al., 2022). Na conformação 1 (Fig. 2.a), por meio do HOMO, observa-se delocalização eletrônica no HOMO sobre vários átomos (2S, 1S, 8C, 6C, 4C, 0S, 3O), o que contribui para a estabilidade da molécula. Essa distribuição favorece a reatividade em múltiplos sítios, especialmente nas regiões de maior densidade eletrônica, que apresentam maior potencial de doação de elétrons e, portanto, são mais suscetíveis a ataques eletrofílicos.

Na conformação 2 (Fig. 2.b), no HOMO, é visto maior densidade eletrônica distribuída sobre os átomos de enxofre (S), oxigênio (O) e carbono (4C, 6C e 8C), com presença de um orbital π associado à ligação dupla entre 8C e 6C, favorecendo a deslocalização eletrônica e as interações com sítios eletrofílicos. Isso sugere que a molécula apresenta boa capacidade de

doação eletrônica por esses sítios, favorecendo interações com regiões eletronicamente deficientes (alvos de ataques eletrofílicos).

Os orbitais LUMO do ajoene encontram-se majoritariamente distribuídos sobre grande parte da superfície molecular, com destaque para a conformação 2, onde se observa maior extensão do orbital sobre diferentes regiões, indicando maior capacidade de aceitar elétrons em múltiplos sítios, favorecendo ataques nucleofílicos e interações com superfícies eletronicamente ricas.

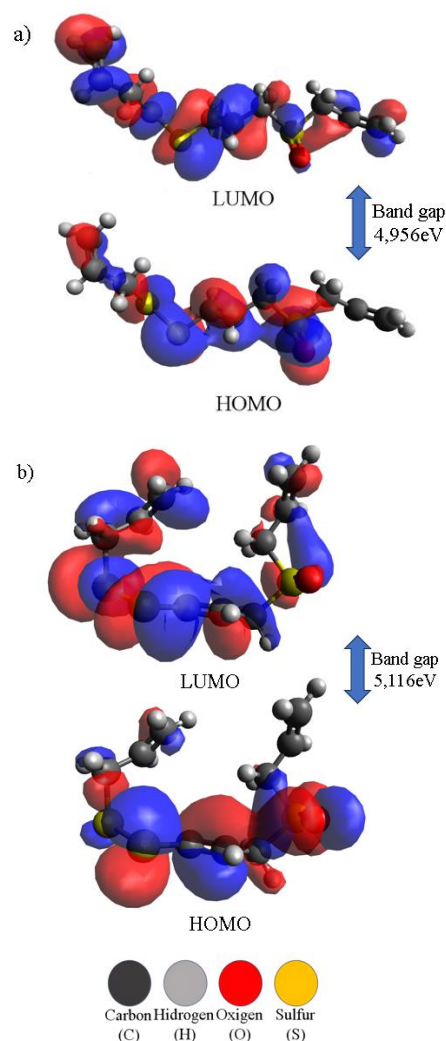


Figura 2. Orbitais moleculares de fronteira da molécula de ajoene. (a) Conf. 1. (b) Conf. 2.

Os valores de energia para os orbitais HOMO e LUMO são mostrados na Tabela 1. De modo geral, um valor elevado de E_{HOMO} indica uma maior tendência do sistema molecular em doar elétrons. Por outro lado, um valor baixo de E_{LUMO} sugere boa capacidade de aceitação eletrônica (Xu et al., 2022). Os valores



obtidos reforçam o potencial da molécula em atuar tanto como doadora quanto como aceitadora de elétrons. A diferença de energia entre os orbitais HOMO e LUMO (ΔE_{gap}) é um parâmetro fundamental para caracterizar o comportamento eletrônico das moléculas. Valores reduzidos de ΔE_{gap} indicam maior reatividade química (Xu et al., 2022).

Tabela 1. Orbitais moleculares HOMO e LUMO

Orbital	Energia (eV)	
	Conf. 1	Conf. 2
Lumo+1	-0,746	-0,674
Lumo	-1,26	-0,988
Homo	-6,216	-6,104
Homo-1	-6,494	-6,442

Adicionalmente, para conformação 1 se observou energia eletrônica total de -1620,885Eh, energia livre de Gibbs de -1620,723Eh, e band gap de 4,956eV. Já para a segunda conformação, a energia total do sistema foi de -1620,881Eh, energia livre de Gibbs de -1620,660Eh, e band gap de 5,116eV. As energias eletrônicas e as energias livres de Gibbs são parâmetros que auxiliam na comparação de estabilidade entre as conformações, sendo a mais estável a configuração com o valor mais negativo (Conf. 1).

Parâmetros Quânticos descritores da reatividade

Na Tabela 2 são mostrados os parâmetros químicos quânticos de ambas as conformações do ajoene. A eletronegatividade (χ) reflete a afinidade da molécula por elétrons, e valores mais altos sugerem maior propensão à formação de ligações (Xu et al., 2022). De acordo com a teoria HSAB, espécies mais suaves (S) possuem maior tendência a doar elétrons, ao passo que compostos mais duros (η) apresentam baixa basicidade e menor capacidade de interação eletrônica (Murulana et al., 2012). Em ambas conformações os

valores são moderados, indicando alta reatividade do ajoene.

Tabela 2. Parâmetros químicos quânticos do ajoene

Parâmetro	Valor	
	Conf. 1	Conf 2. 2
ΔE_{gap}	4,956eV	5,116eV
IE(energia de ionização)	6,216eV	6,104eV
EA(afinidade eletrônica)	1,26eV	0,988eV
eletronegatividade (χ)	3,738eV	3,546eV
Potencial químico(μ)	-3,738eV	-3,546eV
Dureza química(η)	2,478eV	2,558eV
maciez química(S)	0,4eV ⁻¹	0,391eV ⁻¹
Poder de eletrofilicidade(ω)	2,82eV	2,458eV
ΔN	0,75424	0,693

O índice de eletrofilicidade (ω) caracteriza o perfil reativo da molécula, indicando seu comportamento como nucleófilo ou eletrófilo. Valores de ω acima de 1,5 eV sugerem forte caráter eletrófilo, enquanto valores abaixo de 0,8 eV indicam eletrofilicidade fraca (Shanmugam et al., 2018; Domingo and Ríos-Gutiérrez, 2017). De acordo com essas faixas de valores, o ajoene é uma molécula de forte caráter eletrofilico.

A afinidade eletrônica (EA), relacionada ao LUMO, representa a energia liberada quando a molécula ganha um elétron. A energia de ionização, associada ao HOMO, corresponde a energia necessária para



remover um elétron da molécula. O potencial químico (μ) reflete a tendência da molécula em doar carga, influenciando o fluxo eletrônico em reações (Parr *et al.*, 1999; Amrhar e Yacoubi, 2024). O valor positivo de ΔN_{max} indica alta capacidade do composto em doar elétrons (Obot *et al.*, 2009).

Índice de Fukui

O índice de Fukui (ver Tabela 3 e 4) permite identificar os sítios mais reativos de uma molécula frente a ataques eletrofílicos (f^+) e nucleofílicos (f^-), com base na distribuição eletrônica local (Fuentealba *et al.*, 2000). Valores altos de f^- indicam regiões com maior tendência à doação de elétrons (relacionadas ao HOMO), enquanto valores altos de f^+ apontam áreas propensas a aceitar elétrons (relacionadas ao LUMO). Assim, $\Delta fA > 0$ sugere sítio nucleofílico, e $\Delta fA < 0$, sítio eletrofílico.

Tabela 3. Índices de Fukui para a conformação 1 (continua).

Elemento	f^+	f^-	f_0
0 S	0,065321	0,013255	0,039288
1 S	0,199578	0,176686	0,188132
2 S	0,093164	0,140163	0,116664
3 O	0,146251	0,029353	0,087802
4 C	-0,04049	-0,0244	-0,03244
5 C	-0,02988	-0,037	-0,03344
6 C	0,075194	0,040929	0,058062
7 C	-0,02365	0,029246	0,002797

8 C	0,004562	-0,02721	-0,01132
9 C	0,015048	0,071849	0,043449
10 C	-0,02344	-0,06413	-0,04379

Observa-se, na conformação 1, que os átomos 1S e 3O possuem as maiores probabilidades para ataques nucleofílicos e os átomos 1S e 2S maiores probabilidades de ataques eletrofílicos e ataques de radicalar. Já para a segunda conformação, os destaques ficam para os átomos 1S e 3O com as maiores probabilidades de sofrerem ataques nucleofílicos e os átomos 1S e 2S com maiores probabilidades de ataques eletrofílicos e radicalar. Esses átomos indicam os principais sítios de reação química na molécula de ajoene.

Tabela 3. Índices de Fukui para a conformação 1 (continuação).

Elemento	f^+	f^-	f_0
11 C	-0,01084	0,034244	0,011703
12 C	0,020028	0,087297	0,053663
13 H	0,050072	0,018398	0,034235
14 H	0,061846	0,030186	0,046016
15 H	0,036672	0,026729	0,031701
16 H	0,040319	0,031443	0,035881
17 H	0,055843	0,044388	0,050116
18 H	0,026165	0,033169	0,029667
19 H	0,049845	0,037788	0,043817
20 H	0,036309	0,056145	0,046227
21 H	0,017126	0,03346	0,025293
22 H	0,031449	0,036483	0,033966
23 H	0,020093	0,029033	0,024563
24 H	0,032442	0,055434	0,043938
25 H	0,033841	0,0547	0,044271
26 H	0,017129	0,042355	0,029742



Tabela 4. Índices de Fukui para a conformação 2 (continua)

Elemento	f ⁺	f ⁻	f ₀
0 S	0,099567	0,051049	0,075308
1 S	0,18759	0,209066	0,198328
2 S	0,098149	0,174777	0,136463
3 O	0,155912	0,033725	0,094819
4 C	-0,03738	-0,02983	-0,03361
5 C	-0,02826	-0,06145	-0,04485
6 C	0,07552	0,032696	0,054108
7 C	-0,01748	0,039485	0,011002
8 C	-0,00063	-0,05239	-0,02651
9 C	0,01056	0,056618	0,033589
10 C	-0,03015	-0,04095	-0,03555
11 C	-0,02261	-0,01179	-0,0172
12 C	0,001624	0,034455	0,01804
13 H	0,055948	0,043686	0,049817
14 H	0,052813	0,0387	0,045757
15 H	0,00528	0,000621	0,002951
16 H	0,042782	0,039923	0,041353
17 H	0,050207	0,064997	0,057602
18 H	0,035013	0,047148	0,041081
19 H	0,050173	0,060997	0,055585
20 H	0,051368	0,054316	0,052842
21 H	0,034085	0,051474	0,04278

22 H	0,036178	0,043543	0,039861
23 H	0,012664	0,018842	0,015753
24 H	0,033147	0,04297	0,038059
25 H	0,01916	0,021623	0,020392
26 H	0,028773	0,035696	0,032235

Distribuição de Cargas Mulliken e Mapa de Potencial Eletrostático

Na Tabela 5 são mostrados os valores de distribuição de carga de Mulliken na molécula de ajoene. Observa-se em ambas as conformações que há uma concentração de cargas acentuada próximos aos átomos de enxofre (0S) e oxigênio (3O) e moderada próximo aos carbonos 4C, 5C e 12C, indicando uma assimetria na distribuição de carga na molécula. Mas, ao contrário da primeira conformação, nota-se na segunda que os átomos de carbono 6C e 9C também possuem uma moderada concentração de cargas em seu entorno, o que destaca uma variação na concentração de cargas entre as duas conformações e pontua uma possível assimetria na distribuição da carga específica desta conformação.

Tabela 5. Cargas atômicas de Mulliken (continua)

Átomo	Carga	
	Conf. 1	Conf. 2
0 S	0,484668	0,469831
1 S	-0,00574	-0,000783
2 S	-0,06236	-0,075334
3 O	-0,55079	-0,554537
4 C	-0,21963	-0,186165
5 C	-0,20114	-0,222556
6 C	-0,1231	-0,202706
7 C	-0,1083	-0,114601
8 C	-0,09941	-0,061560
9 C	-0,2693	-0,260192

10 C	-0,16193	-0.148406
11 C	-0,1093	-0.121479
12 C	-0,24648	-0.272044
13 H	0,099322	0.134455
14 H	0,128839	0.107371
15 H	0,123443	0.164826
16 H	0,11167	0.102908
17 H	0,123157	0.140114
18 H	0,128013	0.122155
19 H	0,113026	0.114974

O mapa de potencial eletrostático (MPE) é apresentado na Figura 3. As regiões em vermelho indicam áreas com potencial negativo, associadas à maior acumulação de carga eletrônica. Observa-se, em ambas as conformações, uma clara assimetria na distribuição de carga da molécula, evidenciada pelos valores do momento de dipolo: 4,42 Debye para a primeira conformação e 4,07 Debye para a segunda. Essa polaridade acentuada pode favorecer interações intermoleculares, como ligações de hidrogênio, além de influenciar a reatividade em meio polar e a adsorção em superfícies com caráter eletrostático. A presença de regiões com diferentes potenciais também pode orientar seletivamente ataques nucleofílicos ou eletrofílicos.

Tabela 5. Cargas atômicas de Mulliken (continuação)

Átomo	Carga	
	Ajoene 1	Ajoene 2
20 H	0,126796	0.124521
21 H	0,119867	0.128721
22 H	0,120906	0.123318
23 H	0,127881	0.123732
24 H	0,119266	0.116653
25 H	0,117411	0.134245
26 H	0,113214	0.112539

A presença de regiões polares e o alto momento de dipolo do ajoene indicam uma possível capacidade de interação com superfícies biológicas, como a parede

celular de fungos. A assimetria na distribuição de carga, aliada à flexibilidade conformacional da molécula, pode favorecer sua adsorção em componentes como quitina e glicoproteínas, por exemplo, por meio de ligações de hidrogênio, interações eletrostáticas e transferência eletrônica. Nota-se que o átomo OS apresenta carga positiva significativa, enquanto o átomo 3O concentra carga negativa, ressaltando o papel importante do oxigênio na interação com o ambiente externo (ERKOÇ et al., 2003). Além disso, essa assimetria pode influenciar a solubilidade em meios polares, o comportamento em campos elétricos e a afinidade por componentes carregados, potencializando a fixação do ajoene e sua atividade antifúngica ao atuar sobre alvos específicos na parede ou membrana celular.

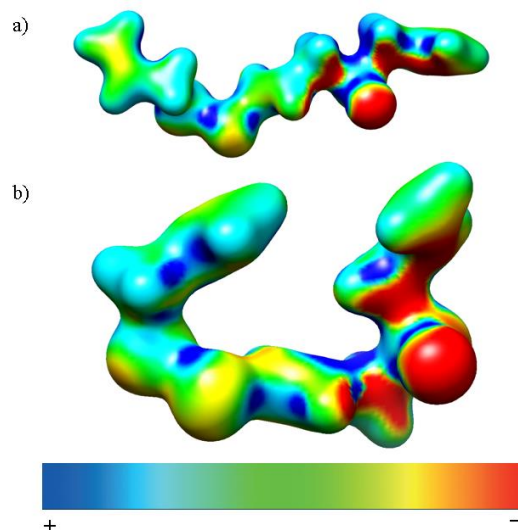


Figura 3. Mapa do potencial eletrostático do ajoene. (a) Conf. 1. (b) Conf. 2.

CONCLUSÃO

Neste trabalho, realizamos um estudo computacional da molécula de ajoene para compreender sua reatividade química e propriedades eletrônicas, visando seu potencial uso como bactericida e antifúngico. Observou-se que a molécula possui forte caráter eletrofílico e alto valor de momento de dipolo, com densidade eletrônica nos átomos de enxofre, oxigênio e carbono, e sítios de ataques químicos sobre os átomos de enxofre e oxigênio, indicando que o ajoene pode ser uma molécula com comportamento químico bioativo.

A molécula de ajoene possui cerca de 10 conformeros, sendo necessários mais estudos para compreender sua estabilidade química e identificar quais conformeros



são mais bioativos. Este estudo forneceu insights preliminares, demonstrando propriedades químicas relevantes para aplicações biológicas. Investigações adicionais sobre as relações de energia entre os conformeros são essenciais para explorar plenamente o potencial biológico do ajoene.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

O presente trabalho foi realizado com o apoio do PIBIC-UFVJM, Bolsista PIBIC/UFVJM, e da FAPEMIG (APQ-00798-24), Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais - Brasil.

REFERÊNCIAS

AMRHAR, Otheman; YACOUBI, Ahmed El. Computational analysis of anionic dyes adsorption on the kaolinite (001) surface: Combination of quantum chemical calculations and molecular simulation methods. *Computational and Theoretical Chemistry*, [s. l.], v. 1236, 2024. DOI <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114573>.

Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2210271X24001129?via%3Dihub>. Acesso em: 3 jun. 2024.

Bassey I., Recent Advances in Computational Design of Organic Materials for Corrosion Protection of Steel in Aqueous Media, in: M. Aliofkhazraei (Ed.), *Developments in Corrosion Protection*, InTech, 2014. 10.5772/57245

BOTELHO, Fernanda Diniz *et al.* COMPARAÇÃO ENTRE MÉTODOS PARA DETERMINAÇÃO DE CARGAS ATÔMICAS EM SISTEMAS MOLECULARES: A MOLÉCULA N-{N-(PTERINA-7-IL)CARBONILGLICIL}-L-TIROSINA (NNPT). *Quim. Nova*, [s. l.], v. 44, ed. 2, p. 161-171, 2021. DOI <http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20170683>.

Disponível em: <https://quimicanova.sbq.org.br/pdf/AR2020-0395>. Acesso em: 3 jun. 2024.

Domingo, L.R., and Ríos-Gutiérrez, M. (2017). A molecular electron density theory study of the reactivity of azomethine imine in [3+ 2] cycloaddition reactions. *Molecules* 22, 750.

DUARTE, Hélio Anderson. Índices de reatividade química a partir da teoria do funcional de densidade: formalismo e perspectivas. *Química Nova*, v. 24, p. 501-508, 2001.

EI-SABER BATIHA, G.; MAGDY BESHBIHY, A.; G. WASEF, L.; ELEWA, Y.H.A.; A. AL-SAGAN, A.; ABD EL-HACK, M.E.; TAHA, A.E.; M. ABD-ELHAKIM, Y.; PRASAD DEVKOTA, H. Chemical constituents and pharmacological activities of garlic (*Allium sativum* L.): A review. *Nutrients*, v. 12, n. 3, p. 872, 2020.

Embrapa - Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária. <<https://www.embrapa.br/agencia-de-informacao-tecnologica/cultivos/>> Acessado em: 15/06/2025.

Erkoç, Ş., Sümer, S., & Erkoç, F. (2003). *Structural and electronic properties of ajoene molecule. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 631(1-3), 271–276. doi:10.1016/s0166-1280(03)00259-8

FREITAS, A. F. S; OLIVEIRA, A. M. Fitoterapia: uso da *Calotropis procera* na medicina popular. *Anais III Conbracis*, Campina Grande: Realize editora, p. 1-9, 2018.

F. Neese: Software update: the ORCA program system, version 4.0 (WIREs Comput Mol Sci 2018, 8:e1327. doi: 10.1002/wcms.1327)

F. Silva, S. S. Khokhar, D. M. Williams, R. Saunders, G. J. S. Evans, M. Graz, T. Wirth, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2018, 57, 12290.

Fuentealba, P., Pérez, P., and Contreras, R. (2000). On the condensed Fukui function. *The Journal of Chemical Physics* 113, 2544-2551.

GRUHLKE, M. C.; NICCO, C.; BATTEUX, F.; SLUSARENKO, A. J. The effects of allicin, a reactive sulfur species from garlic, on a selection of mammalian cell lines. *Antioxidants*, v. 6, p. 1, 2016.



Kaya S., Guo L., Kaya C., Tüzün B., Obot I.B., Tourir R., Islam N., Quantum chemical and molecular dynamic simulation studies for the prediction of inhibition efficiencies of some piperidine derivatives on the corrosion of iron, J. Taiwan Inst. Chem. Eng. 65 (2016) 522–529, <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2016.05.034>.

Khelifa M., El Hamidi S., Sadiq M., S. S., Kaya S., Barka N., Abdennouri M., Adsorption mechanisms investigation of methylene blue on the (0 0 1) zeolite 4A surface in aqueous medium by computational approach and molecular dynamics, Appl. Surf. Sci. 572 (2022) 151381, <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.151381>.

Koopmans, T., Über die zuordnung von wellenfunktionen und eigenwerten zu den einzelnen elektronen eines atoms, Physica 1 (1934) 104–113, [https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(34\)90011-2](https://doi.org/10.1016/S0031-8914(34)90011-2)

MAIDMENT, D. C. J.; DEMBANY, Z.; WATTS, D. I. The anti-bacterial activity of 12 alliums against Escherichia coli. Nutrition & Food Science, 2001.

Murulana, L.C., Singh, A.K., Shukla, S.K., Kabanda, M.M., and Ebenso, E.E. (2012). Experimental and quantum chemical studies of some bis (trifluoromethyl-sulfonyl) imide imidazolium-based ionic liquids as corrosion inhibitors for mild steel in hydrochloric acid solution. Industrial & Engineering Chemistry Research 51, 13282-13299

Obot, I., Obi-Egbedi, N., and Umoren, S. (2009). Adsorption characteristics and corrosion inhibitive properties of clotrimazole for aluminium corrosion in hydrochloric acid. International Journal of Electrochemical Science 4, 863-877

Ouaket, A., Chraka, A., Raissouni, I., El Amrani, M.A., Berrada, M., and Knouzi, N. (2022). Synthesis, spectroscopic (¹³C/¹H-NMR, FT-IR) investigations, quantum chemical modelling (FMO, MEP, NBO analysis), and antioxidant activity of the bis-benzimidazole molecule. Journal of Molecular Structure 1259, 132729.

Parr R.G., Szentpaly L.v., Liu S., Electrophilicity index, J. Am. Chem. Soc. 121 (1999) 1922–1924, <https://doi.org/10.1021/ja983494x>.

Pearson, R.G., Absolute electronegativity and hardness: application to inorganic chemistry, Inorg. Chem. 27 (1988) 734–740, <https://doi.org/10.1021/ic00277a030>

Shanmugam, G., Lee, S.K., and Jeon, J. (2018). Identification of potential nematocidal compounds against the pine wood nematode, Bursaphelenchus xylophilus through an in silico approach. Molecules 23, 1828.

Xu, Y.-l., Huang, K.-h., Li, H.-q., Huang, W., Cheng, L., and Yang, S.-y. (2022). Adsorption mechanism of styryl phosphonate ester as collector in ilmenite flotation. Transactions of Nonferrous Metals Society of China 32, 4088-4098

YADAV, Seema; TRIVEDI, Niyati A.; BHATT, Jagat D. Antimicrobial activity of fresh garlic juice: An in vitro study. Ayu, v. 36, n. 2, p. 203, 2015.

Yoo, M., Lee, S., Kim, S. and Shin, D. (2014), Optimizing conditions for E-and Z-ajoene formation from garlic juice using response surface methodology. Food Sci Nutr, 2: 605-611.