

ESTUDO TEÓRICO DA REATIVIDADE QUÍMICA DO AJOENE VIA DFT

João P. O. Nunes¹, Daniel S. de Oliveira¹, Alinne M. M. Reis¹, Max P. Gonçalves¹, Welyson T. S. Ramos¹

¹Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Instituto de Engenharia, Ciência e Tecnologia, Janaúba, MG, Brasil, 39447-814

e-mail: joao.nunes@ufvjm.edu.br; welyson.ramos@ufvjm.edu.br

O alho é amplamente reconhecido por suas propriedades medicinais e pela variedade de benefícios à saúde atribuídos aos seus compostos organossulfurados, que incluem atividades anticancerígenas, antifúngicas, antitrombóticas, antivirais e antioxidantes. Entre esses compostos se destaca o ajoene ($C_9H_{14}OS_3$), por sua estabilidade e atividade biológica. Porém, os mecanismos de interação entre essa molécula e sistemas biológicos ainda não são compreendidos. Neste trabalho é estudada as propriedades vibracionais e eletrônicas do ajoene, através da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). As coordenadas moleculares foram obtidas no banco de dados Pubchem, CID 5386591, e otimizadas via DFT. Os cálculos foram realizados utilizando o funcional B3LYP, a base def2-TZVPP e a base auxiliar def2/J. Não foram observadas frequências negativas. Nos cálculos de energia, observou-se energia total do sistema de -1620,88Eh, energia livre de Gibbs de -1620,72Eh, HOMO -6,22eV, LUMO -1,26eV e band gap de 4,96eV. Nas frequências vibracionais, observou-se picos de absorção predominantes em 1112,28 cm⁻¹, 984,20 cm⁻¹ e 962,76 cm⁻¹. Ainda é preciso realizar ajustes nos espectros de absorção e comparação com dados experimentais, pois foram consideradas vibrações harmônicas. Através da análise do Homo, foi possível identificar uma distribuição assimétrica das cargas na molécula. Os cálculos para o momento de dipolo retornaram um valor de 4.42 Debye, confirmando a alta assimetria de cargas da molécula e indicando uma possível alta reatividade química com moléculas carregadas e íons. Com os índices de Fukui encontrados, observou-se que os átomos 1S e 3O possuem as maiores probabilidades para ataques nucleofílicos, os átomos 1S e 2S maiores probabilidades de ataques eletrofílicos e ataques de radicalar. Esses átomos indicam os principais sítios de reação química na molécula de ajoene. Esta molécula possui cerca de 10 confôrmeros, sendo necessários mais estudos para compreender sua estabilidade química e identificar quais confôrmeros são mais bioativos. Este trabalho forneceu *insights* preliminares, demonstrando propriedades químicas relevantes para aplicações biológicas. Investigações adicionais sobre as relações de energia entre os confôrmeros são essenciais para explorar plenamente o potencial biológico do ajoene.

Agradecimentos: Este trabalho foi realizado com apoio do PIBIC/UFVJM, FAPEMIG, CNPq, PROEXC/UFVJM, Proext-PG Capes, PRPPG/UFVJM, BIOSEM-LESMA.