

A TOXICIDADE DA AMÔNIA: UMA ABORDAGEM TEÓRICA

 <https://doi.org/10.56238/sevened2024.033-005>

Antonia Beatriz Cavalcante David Vieira

E-mail: beatrizca3155@gmail.com

RESUMO

A amônia, um composto de grande importância nos dias atuais, está presente em atividades agrícolas e até mesmo na indústria tecnológica, como na geração de energia limpa. Este capítulo abordará uma breve análise sobre a toxicidade da amônia no organismo humano através de resultados teóricos utilizando métodos bastante úteis da química computacional, analisando as propriedades básicas e de solubilidade dessa substância como também sua biodisponibilidade de acordo com a mudança de pH.

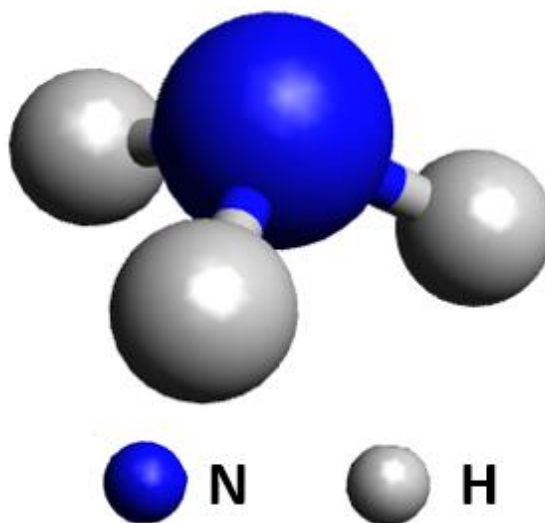
Palavras-chave: Amônia. Toxicidade. Biodisponibilidade.

1 INTRODUÇÃO

O nitrogênio existente na natureza pode ser encontrado nas seguintes formas: nitrogênio gasoso (N_2), íon nitrito (NO_2^-), íon nitrato (NO_3^-), íon amônio (NH_4^+) e amônia (NH_3). A amônia é um composto gasoso, sem cor, que possui um forte odor desagradável (THANS, 2008).

A amônia está bastante presente na agricultura como um dos compostos que são excretados após uma produção (SOUSA, *et al*, 2016), como também na indústria como combustível para a geração de energia limpa (YAPICIOGLU; DINCER, 2019).

Estrutura tridimensional da amônia



Fonte: Antonia Beatriz Cavalcante David Vieira

2 METODOLOGIA

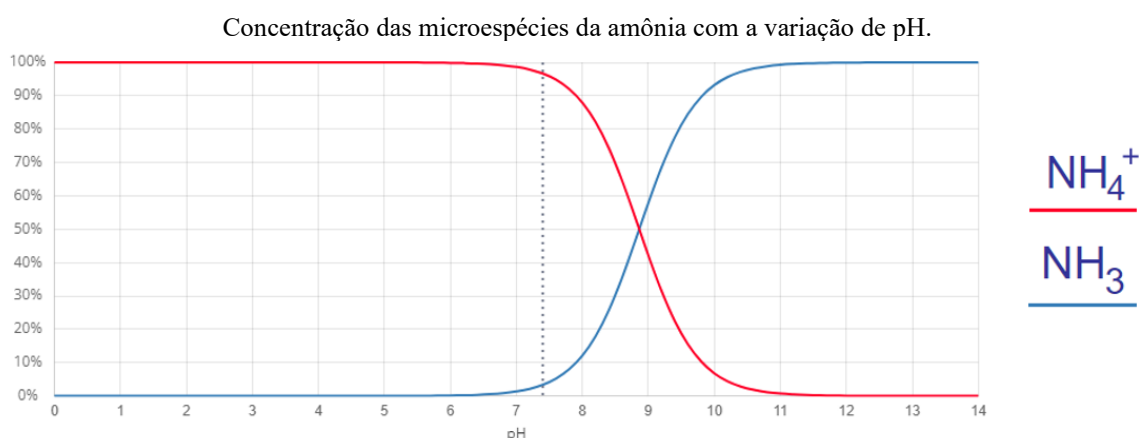
A estrutura tridimensional da amônia foi plotada no programa Avogadro: um construtor molecular e ferramenta de visualização de código aberto, na versão 1.2.0 (<http://avogadro.cc/>), indexado ao servidor online Playground Chemaxon© (<https://disco.chemaxon.com/calculators/demo/playground/>) para a análise das microespécies, valor de pKa e coeficientes de solubilidade e lipofilicidade.

3 RESULTADOS

A amônia possui uma massa molecular de 17,03 g/mol e um pKa igual a 8,86, ou seja, é um composto básico. Tal substância coexiste com a sua forma ionizada (NH_4^+) e suas concentrações podem variar de acordo com o pH do meio (BERNARDI, 2022). No pH fisiológico (pH = 7,40) a espécie ionizada tem uma concentração igual a 96,70% e a espécie não ionizada com concentração igual a 3,30% (Figura 2).

Os coeficientes de partição ($\log P$) e de distribuição ($\log D$) são parâmetros usados como medida quantitativa da lipofilicidade de compostos bioativos (WAGER *et al*, 2016), são importantes para que se entenda o comportamento de substâncias no meio em que estão inseridas.

A amônia apresenta os seguintes valores: -0,98 para o $\log P$ e 0,53 para o $\log D$, ou seja, o valor do coeficiente de partição indica que a amônia possui uma boa solubilidade, e o valor do coeficiente de distribuição, em pH fisiológico, menor que 1, indica que o composto possui uma baixa absorção devido à sua alta permeabilidade, e também apresentam uma alta eliminação renal (KAH; BROWN, 2008).



Fonte: Antonia Beatriz Cavalcante David Vieira

4 CONCLUSÃO

Através das análises apresentadas, entende-se que, a amônia é tóxica no organismo humano e o pH fisiológico pode interferir a biodisponibilidade do composto devido à sua absorção oral desfavorável, entretanto, vale ressaltar que em quantidades controladas, a amônia será dissolvida no organismo, não será absorvida e terá uma alta tendência a ser eliminada via renal.

REFERÊNCIAS

- BERNARDI, F. Uso de Quitina e Quitosana como adsorventes de Amônia de efluentes aquícolas: revisão de literatura. Arquivos de Ciências Veterinárias e Zoologia da Unipar, Umuarama, v. 25, n. 2, p. 1-14, 2022.
- KAH, M.; BROWN, C. D. LogD: Lipophilicity for ionisable compounds. Chemosphere, v. 72, p. 1401-1408, 2008.
- SOUSA, F. C. *et al.* Medidas para minimizar a emissão de amônia na produção de frangos de corte: revisão. Brazilian Journal of Biosystems Engineering, v. 10, n. 1, p. 51-61, 2016.
- THANS, F. C. Controle Operacional de Reator em Bateladas Sequenciais (RBS): Ajustes na Concentração de Oxigênio Dissolvido Visando a Remoção de Nutrientes. Florianópolis, 2008, 105 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) -Universidade Federal de Santa Catarina.
- WAGER, T. et al. Central Nervous System Multiparameter Optimization Desirability: Application in Drug Discovery. ACS Chemical Neuroscience, v. 7, n. 3, p 767-775, 2016.
- YAPICIOGLU, A; DINCER, I. A review on clean ammonia as a potential fuel for power generators. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 103, p. 96-108, 2019.