

Inibidores de urease no solo para desenvolvimento agrícola: cenário atual e perspectivas

Brenda Costa Nunes De Souza¹; Bianca das Graças de Oliveira Miranda¹; Kamila Domingos de Paula¹; Juliana Baptista Simões^{2*}

¹ Estudante do Técnico em Química do IFFluminense Campus Itaperuna; ² Professora do IFFluminense Campus Itaperuna.

*jsimoes@iff.edu.br

Resumo

As enzimas são proteínas e catalisadores produzidos por qualquer organismo vivo, aumentando a velocidade da reação. No solo, a urease catalisa a hidrólise da ureia em dióxido de carbono e amônia; a amônia se transforma em amônio, podendo ser absorvida pelas plantas como fonte de nitrogênio ou seguir a rota de nitrificação e ser absorvida como nitrato - por isso, a ação da urease é importante para a agricultura -, porém, o aumento rápido da concentração de amônia pode levar à perda do nitrogênio por volatilização. Neste contexto, a adição de um inibidor da ação da urease pode ser efetiva para reduzir essa perda. Inibidores de urease são substâncias que reduzem a hidrólise da ureia diminuindo a concentração de amônia na superfície do solo. O objetivo deste trabalho é realizar uma análise de estudos que avaliaram os inibidores de urease através de dinâmica molecular. Os estudos computacionais permitem comparar a dinâmica molecular de cada substância, chegando ao resultado do melhor inibidor. Ao comparar os mecanismos de ação e descobrir quais inibidores têm os melhores rendimentos, pode-se indicar um perfil de utilização, prevendo qual melhor substância e concentração para aplicação. Os inibidores mais eficientes descritos são as fosfortriamidas, sendo o *N*-(*n*-butil)tiofosforicotriamida o composto mais comercializado como inibidor da urease. Os estudos encontrados de dinâmica molecular empregam como inibidores ácido bórico, diaminofosfato e *N*-(*n*-butil) tiofósforicotriamida e demonstram que a etapa chave para a ação inibitória é a coordenação dos mesmos aos átomos de níquel do sítio ativo da enzima.

Palavras-Chave: Catálise. Amônia. Ureia. Agricultura. Nitrogênio.

Instituição de fomento: IFFluminense.