



PROGRAMA DE DISCIPLINA

Código:	CIB 082		
Nome da disciplina:	T.E. em GBM III: Metabolômica aplicada às Ciências Agrárias: mitigação de estresse para agricultura sustentável		
Pré-requisitos:			
Carga horária:	Teórica 30 :	Prática: 30	Total: 60
Crédito:	Teórica 2 :	Prática: 1	Total: 3
Ementa:	1) Abordagens Ômicas: conceitos fundamentais, Genômica, Transcriptômica, Proteômica, Lipidômica e Metabolômica. 2) O Metaboloma: Metabolismo, classificação de metabólitos e desafios em Metabolômica. 3) Introdução à Metabolômica: conceitos, vantagens e limitações de Metabolômica Targeted e Untargeted. 4) Desenvolvimento de projetos em Metabolômica: planejamento experimental, tipos de amostras, amostragem, fluxograma de trabalho e escolha de técnicas analíticas. 5) Técnicas de amostragem: métodos de extração, conservação e processamento de amostras. 6) Abordagens analíticas em Metabolômica: LC-MS, GC-MS e RMN. 7) Processamento e análise de dados: pré-processamento de dados obtidos por LC-MS. 8) Processamento estatístico e análise de dados. 9) Identificação/Anotação estrutural: ferramentas de bioinformática, bibliotecas espectrais, bases de dados, plataforma GNPS e ferramentas de desreplicação in silico. 11) Validação e interpretação biológica: rotas metabólicas e significância bioquímica dos resultados. 12) Metabolômica e bioenergia: análise de estudos voltados ao desenvolvimento de energia limpa e sustentável (ODS 13 e ODS 7); 13) Papel da Metabolômica no melhoramento de plantas para mitigação das mudanças climáticas e desenvolvimento sustentável (ODS 2 e ODS 13); 14) Metabolômica como ferramenta no desenvolvimento de produtos biotecnológicos (ODS 2) ; 15) Sessão prática (Hands-On): Treinamento em processamento e análise de dados de LC-MS. 16) Estado-da-arte em Metabolômica: Discussão de artigos científicos recentes e desenvolvimento de novas técnicas de análise e processamento de dados.		
Objetivos: Ex: 1) Discutir 2) Buscar o entendimento de 3) Abordar 4) Fornecer subsídios para 5) Discutir as aplicações	Este curso tem como objetivo introduzir os princípios da metabolômica como ferramenta para a compreensão dos metabólitos presentes em sistemas biológicos (plantas e fungos), possibilitando o monitoramento preciso de suas respostas fisiológicas quando submetidos a diferentes condições ambientais e de manejo. O objetivo central é capacitar o corpo discente para o estudo aprofundado das respostas bioquímicas e fisiológicas, bem como para o entendimento do metabolismo e de suas respectivas vias de ação nos sistemas biológicos de interesse. A disciplina proporcionará uma visão abrangente sobre o metaboloma e suas implicações na pesquisa científica e tecnológica, abrangendo desde o planejamento experimental até a interpretação biológica dos resultados. Serão abordadas as principais técnicas analíticas, como LC-MS, GC-MS e RMN, além de metodologias avançadas de processamento e análise de dados, incluindo ferramentas bioinformáticas e métodos quimiométricos. Por meio de atividades teóricas e práticas, busca-se desenvolver competências para o planejamento e a execução de estudos metabolômicos completos, bem como fomentar a análise crítica de artigos científicos atuais. Dessa forma, os discentes poderão acompanhar o estado da arte da área, compreender como aplicar a metabolômica em suas pesquisas e contribuir para o avanço do campo por meio do desenvolvimento de novos métodos analíticos e interpretativos, alinhados com os objetivos de desenvolvimento sustentável de Segurança Alimentar (ODS 2), Agricultura sustentável e a Ação contra a mudança global do clima (ODS 13).		

Justificativas:	A crescente demanda por soluções inovadoras e sustentáveis para os desafios enfrentados nas ciências exige a adoção de ferramentas analíticas de alta resolução capazes de compreender, em nível molecular, os mecanismos que regem as respostas fisiológicas e bioquímicas de plantas e microrganismos. Nesse contexto, a metabolômica destaca-se como abordagem estratégica para o monitoramento de metabólitos em sistemas biológicos, permitindo não apenas a elucidação de vias metabólicas, mas também o desenvolvimento de práticas agrícolas mais eficientes, resilientes e alinhadas com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável. O avanço das tecnologias analíticas (como a espectrometria de massas) e de ferramentas bioinformáticas tem ampliado significativamente as possibilidades de aplicação da metabolômica em áreas-chave das ciências, incluindo o melhoramento genético de culturas, a otimização de sistemas produtivos e o desenvolvimento de produtos biotecnológicos. Apesar do seu potencial transformador, ainda há uma lacuna na formação de profissionais com domínio integrado dos conceitos teóricos, metodologias experimentais e estratégias de análise e interpretação de dados metabolômicos. A presente proposta de disciplina visa preencher essa lacuna, proporcionando aos discentes a oportunidade de desenvolver competências técnicas e analíticas, com base em abordagens teóricas e práticas. O conteúdo programático foi estruturado para oferecer uma visão completa, desde os fundamentos das abordagens ômicas até a interpretação biológica de resultados, integrando análise crítica de literatura científica e treinamento prático em processamento de dados metabolômicos.
Metodologia:	A disciplina será conduzida por meio de aulas teóricas e práticas, combinando exposições dialogadas, estudo de caso, seminários e atividades experimentais. A metodologia inclui: 1) Aulas expositivas e dialogadas: introdução aos conceitos fundamentais da metabolômica e suas aplicações; discussão sobre as principais técnicas analíticas (LC-MS, GC-MS, RMN) e métodos quimiométricos. 2) Estudo dirigido e leitura crítica: análise de artigos científicos de alto impacto recentes sobre metabolômica voltada às ciências agrárias e sustentabilidade; discussão sobre tendências e avanços tecnológicos na área. 3) Atividades práticas (hands-on): treinamento no processamento e análise de dados espectrais obtidos por LC-MS; aplicação de ferramentas bioinformáticas para anotação estrutural e interpretação de dados; aplicação de softwares e bibliotecas espectrais de domínio público. 4) Seminários temáticos: apresentação e debate de temas relevantes na metabolômica, abordando estudos de caso e inovações metodológicas. 5) Desenvolvimento de artigos científicos: produção de um artigo de revisão sobre tópicos específicos na área; A abordagem integrativa visa capacitar os discentes na análise de perfis metabólicos complexos, no desenvolvimento de estudos metabolômicos completos, na interpretação dos resultados com relevância biológica e tecnológica e suas aplicações voltadas ao desenvolvimento sustentável e mitigação das mudanças climáticas.
Avaliação:	1. Prova escrita: avaliação individual; 2. Seminários temáticos: apresentação e discussão de temas relevantes em metabolômica, com base em artigos científicos atuais e alinhados ao estado-da-arte. 3. Artigo de revisão: produção de um texto científico que sintetize conhecimentos sobre tópicos específicos em metabolômica e sua aplicação nas áreas de desenvolvimento sustentável e mudanças climáticas.
Conteúdo Programático: listar	1) Princípios e conceitos fundamentais em abordagens ômicas: Genômica, Transcriptômica, Proteômica, Lipidômica e Metabolômica; 2) O metaboloma: compreensão do metabolismo, classificação dos metabólitos e desafios metabolômicos; 3) Introdução à metabolômica: Metabolômica Targeted e Untargeted (conceitos, aplicações, vantagens e limitações);

	4) Principais etapas no desenvolvimento de projetos em metabolômica: fluxograma de trabalho, tipo de amostra, amostragem e planejamento experimental, escolha das técnicas analíticas, escolha do método de processamento estatístico; 5) Principais técnicas de amostragem: métodos de extração, conservação e processamento de amostras para metabolômica; 6) Abordagens analíticas em metabolômica: técnicas de aquisição de dados e estratégias de análise (Cromatografia Líquida acoplada à Espectrometria de Massas - LC-MS, Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas - GC-MS, Espectrometria de Massas de Alta Resolução - HRMS, Ressonância Magnética Nuclear - RMN); 7) Processamento e análise de dados em Metabolômica: pré-processamento de dados de HRMS; 8) Métodos quimiométricos aplicados à Metabolômica: análise estatística uni e multivariada (PCA, HCA, PLS-DA e OPLS-DA); 9) Identificação e anotação estrutural de metabólitos: ferramentas de bioinformática aplicadas à metabolômica, níveis de anotação metabólica, bibliotecas espectrais, repositório e base de dados, potencialidades e aplicações da plataforma GNPS, ferramentas de desreplicação in silico; 10) Validação e interpretação biológica: rotas metabólicas e significância biológica dos resultados; 11) Estudos metabolômicos voltados ao melhoramento de plantas de valor comercial agregado (produção agrícola e bioenergia); 12) Estudos metabolômicos no desenvolvimento de produtos biotecnológicos 11) Seção hands-on em metabolômica: treinamento prático no processamento e análise de dados em metabolômica empregando dados de LC-HRMS; 12) O estado-da-arte da metabolômica: apresentação e discussão de artigos científicos do estado-da-arte da metabolômica e desenvolvimento de novas técnicas de análise e processamento de dados.
Referências Bibliográficas:	1) Weckwerth, W. (2019). Metabolomics: Methods and Protocols. 2) Salek, R. M., et al. (2013). The Handbook of Metabonomics and Metabolomics. 3) Metabolomics Data Preprocessing: From Raw Data to Features for Statistical Analysis. In: Comprehensive Analytical Chemistry, Volume 82, 2018. 4) Dewick, P. M. (2008). Medicinal Natural Products: a biosynthetic approach 3rd ed. 5) McMaster, M.C. (2005). LC/MS: a practical user's guide. 6) McMaster, M.C. (2007) GC/MS: a practical user's guide. 6) Barh, D. et al. (2013), 1st ed. OMICS - Applications in Biomedical, Agricultural and Environmental Sciences. 7) Artigos científicos: 1) Pilon, A. C., et al. 2021. Molecular networks: An analysis on annotations and discovery of new assets. Quim. Nova 44, 1168–1179. 2) Wang, M. et al., 2016. Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking. Nat. Biotechnol. 34, 828–837. 3) Da Silva, R. R. et al., 2018. Propagating annotations of molecular networks using in silico fragmentation. PLoS Comput. Biol. 14, 1–26. 8) Ernst, M. et al. 2019. Molnetenhancer: Enhanced molecular networks by integrating metabolome mining and annotation tools. Metabolites 9, 144. 9) ccms-ucsd.github.io/GNPSDocumentation/. Van Emon, J.M. The OMICS revolution in agricultural research. J. Agric. Food. Chem. 2016,61,1, 36-44.
Docente responsável (nome e assinatura)	Nome: Prof. Dra. Gesiane da Silva Lima
* Custos reais da disciplina: apresentar, se pertinente, orçamento previsto para o exercício, em folha anexa	