



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO**

Via Washington Luís, Km 235 - Caixa Postal 676

Fones: (16) 3351-8109 / 3351-8110

Fax: (16) 3361-3176

CEP 13.565-905 - São Carlos - SP - Brasil

End. Eletrônico: propp@ufscar.br

**FICHA DE CARACTERIZAÇÃO DE DISCIPLINAS**

**1. Programa de Pós-Graduação em:**

Programa de Pós-Graduação em Química

**2. Objetivo da Ficha:** Alteração de disciplina.

|                      |         |                   |    |                    |                     |
|----------------------|---------|-------------------|----|--------------------|---------------------|
| Código da Disciplina | QUI.120 | Total de Créditos | 13 | Início de Validade | 1o. período de 2025 |
|----------------------|---------|-------------------|----|--------------------|---------------------|

|                    |                                                       |
|--------------------|-------------------------------------------------------|
| Nome da Disciplina | Estudos Metabômicos Via Ressonância Magnética Nuclear |
|--------------------|-------------------------------------------------------|

**Campos a serem Alterados**

|                                                          |                                             |                                         |                                            |
|----------------------------------------------------------|---------------------------------------------|-----------------------------------------|--------------------------------------------|
| <input checked="" type="checkbox"/> Código da Disciplina | <input type="checkbox"/> Nome da Disciplina | <input type="checkbox"/> Carga Horária  | <input checked="" type="checkbox"/> Ementa |
| Código Anterior: QUI.500-1/25                            | <input type="checkbox"/> Créditos           | <input type="checkbox"/> Pré-Requisitos |                                            |

Justificativa:

Nova grade curricular a partir de 2025

**3. Carga Horária da Disciplina:**

|                |    |                |   |                         |     |
|----------------|----|----------------|---|-------------------------|-----|
| Aulas Teóricas | 72 | Aulas Práticas | 0 | Exercícios e Seminários | 123 |
|----------------|----|----------------|---|-------------------------|-----|

**4. Ementa da Disciplina:**

1. Matrizes de estudo: fluídos biológicos (soro, plasma, urina) e extratos vegetais (caule, raízes, flores, frutos, folhas e galhos).

2. Questões a serem respondidas.

3. Coleta das amostras: a) fluídos biológicos (aprovação do comitê de ética, cuidados na coleta, grupos sadios/enfermos, número de participantes, etc). b) extratos vegetais (partes da planta, sazonalidade, regionalidade, hora da coleta, etc).

4. Protocolo do preparo das amostras: a) automatizado - utilizando a plataforma IVDr (para fluídos biológicos). b) manual (fluídos biológicos e extratos vegetais) utilização de filtros, precipitação de proteínas com solventes, quantidade de amostras, quantidade de solvente, uso de centrifugação, uso de solução tampão, uso de solução estoque com referência interna, etc).

5. Sequência(s) de pulso utilizada(s): a) sequências de pulsos: noesypr1d, noesygppr1d, zgcprr, zgpr, filtro de T2 e J-resolved. b) número de promediações (ns), tempo de relaxação (d1), tempo de aquisição (aq) e janela espectral (sw), ganho do receptor (rg) c) controle de temperatura, calibração e potência de pulsos.

6. Controle de qualidade dos espectros.: a) automatizado IVDr; b) manual: tuning/matching, shimming, largura de linha a meia altura do sinal do TSPA-d4, processamento e alinhamento dos espectros.

7. Utilização do programa Chenomix para caracterização estrutural e quantificação das substâncias

presentes na matriz de fluido biológico. Estruturação do banco de dados para análise. a) aulas teóricas b) exercícios através de acesso remoto.

8. Fluxo de trabalho para a análise e interpretação de dados em estudos metabolômicos a) Preparação dos dados. b) Análises quimiométricas. c) Interpretação funcional dos dados: topologia e enriquecimento de vias metabólicas

## 5. Caráter da Disciplina:

Criada para o curso de:

☐

Mestrado

☐

Doutorado

☐

Mestrado Profissional

☒

Todos

Caráter para mestrado:

☐

Obrigatória para:

☒

Optativa para:

Química.

☐

Alternativa para:

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

Caráter para doutorado:

☐

Obrigatória para:

☒

Optativa para:

Química.

☐

Alternativa para:

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

Caráter para mestrado profissional:

☐

Obrigatória para:

☐

Optativa para:

☒

Alternativa para:

Ensino em Química, Química Tecnológica.

☐

Área de Concentração para:

☐

Específica de Linha para:

## 6. Disciplinas que São Pré-Requisitos:

## 7. Bibliografia Principal:

1- CLARIDGE, T. D.W. High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. 3a Ed. Elsevier Science. Amsterdam. 2016. 552 pp.

2- GOWDA, G. A. N.; RAFTERY, D. NMR-Based Metabolomics: Methods and Protocols, 2019: Springer.

3- FERREIRA, M. M. C. Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações, 2015: Editora da UNICAMP.

4- HARWOOD, J.S.; MO, H. Practical NMR Spectroscopy Laboratory Guide. 1a. Ed. Elsevier. 2016. 127 pp.

5- GARCIA-PEREZ, I., POSMA, J.M., SERRANO-CONTRERAS, J.I. et al. Identifying unknown metabolites using NMR-based metabolic profiling techniques. Nat Protoc 15, 25382567 (2020).

6- DONA, A.C.; JIME&#769;NEZ, B.; SCHÄFER, H.; HUMPFER, E.; SPRAUL, M.; LEWIS, M.R.; PEARCE, J.T.M.; HOLMES, E.; LINDON, J.C.; NICHOLSON, J.K. Precision High-Throughput Proton NMR Spectroscopy of Human Urine, Serum, and Plasma for Large-Scale Metabolic Phenotyping Anal. Chem. 86, 9887&#8722;9894 (2014).

7- OCAMPOS, F.M.M.; SOUZA, A.J.B.; RIBEIRO, G.H., ALMEIDA, L.S., CÔNSOLO, N.R.B.; COLNAGO, L.A. NMR-based plant metabolomics protocols: a step-by-step guide Front. Nat. Prod., 3, 1-21 (2024).

## 8. Principais Docentes Responsáveis:

Antonio Gilberto Ferreira

## 9. Aprovação da Coordenação do Programa de Pós-Graduação:

Aprovada na 571a. reunião da coordenação deste programa de pós-graduação, realizada em 05/02/2025.

\_\_/\_/\_\_\_\_