




C A P Í T U L O 2

ONTOGENIA QUÍMICA: A DINÂMICA DOS METABÓLITOS ESPECIALIZADOS AO LONGO DO DESENVOLVIMENTO VEGETAL

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.229112610042>

Dannily Augusto Rebouças

Laboratório Farmácia da Terra, Faculdade de Farmácia,
Universidade Federal da Bahia – Salvador – BA
<http://lattes.cnpq.br/4408029953764841>

Lina da Silva Florencio

Laboratório Farmácia da Terra, Faculdade de Farmácia,
Universidade Federal da Bahia – Salvador – BA
<http://lattes.cnpq.br/4574498985702480>

Jéssica Sales Felisberto

Laboratório Farmácia da Terra, Faculdade de Farmácia,
Universidade Federal da Bahia – Salvador – BA
<https://lattes.cnpq.br/8276429436003589>

Davyson de Lima Moreira

Laboratório de Produtos Naturais e Bioquímica
Instituto de Pesquisa Jardim Botânico do Rio de Janeiro - Rio de Janeiro - RJ
<http://lattes.cnpq.br/7863875298510179>

Ygor Jessé Ramos

Laboratório Farmácia da Terra, Faculdade de Farmácia,
Universidade Federal da Bahia – Salvador – BA
<http://lattes.cnpq.br/3271824948370332>

RESUMO: Neste capítulo, a ontogenia química é apresentada como um eixo central para a compreensão da dinâmica do metabolismo especializado ao longo do desenvolvimento das plantas. Inicialmente, são discutidos os fatores genéticos, fisiológicos e ambientais que influenciam a produção de metabólitos ao longo dos diferentes estágios de desenvolvimento vegetal, destacando-se as variações qualitativas e quantitativas observadas no perfil químico. Em seguida, são apresentadas as principais abordagens analíticas empregadas na investigação desses metabólitos, incluindo técnicas cromatográficas e espectrométricas, bem como estratégias metabolômicas e ferramentas de quimiometria utilizadas na organização

e interpretação do conjunto de dados complexos. Por fim, o capítulo discute as implicações dos estudos de ontogenia química em produtos naturais, evidenciando sua importância para aplicações em áreas como farmacognosia, quimiotaxonomia, quimiofenética e prospecção de compostos bioativos.

PALAVRAS-CHAVE: Variações ontogenéticas; ômicas; produtos naturais; fatores moduladores.

CHEMICAL ONTOGENY: THE DYNAMICS OF SPECIALIZED METABOLITES THROUGHOUT PLANT DEVELOPMENT

ABSTRACT: In this chapter, chemical ontogeny is presented as a central axis for understanding the dynamics of specialized metabolism throughout plant development. Initially, the genetic, physiological, and environmental factors that influence metabolite production during different stages of plant development are discussed, highlighting the qualitative and quantitative variations observed in the chemical profile. Next, the main analytical approaches employed in the investigation of these metabolites are presented, including chromatographic and spectrometric techniques, as well as metabolomic strategies and chemometric tools used in the organization and interpretation of complex datasets. Finally, the chapter discusses the implications of chemical ontogeny studies in natural products, highlighting their importance for applications in areas such as pharmacognosy, chemotaxonomy, chemophenetic and the discovery of bioactive compounds.

KEYWORDS: Ontogenetic variations; omics; natural products; modulating factors.

INTRODUÇÃO

A ontogenia química constitui um eixo fundamental para a compreensão da dinâmica de produção de metabólitos ao longo do desenvolvimento biológico em sistemas vivos. Em biologia, ontogenia refere-se ao conjunto de transformações experimentadas por um organismo individual durante seu ciclo de vida, desde a embriogênese até a senescência, incluindo processos de crescimento, diferenciação, maturação e reprodução. A ontogenia vegetal corresponde à transição geneticamente regulada das plantas, frequentemente descritas em termos de estágios de desenvolvimento. Esses estágios abrangem as fases de semente, germinante/plântula, juvenil, adulto vegetativo, adulto reprodutivo e senescente, embora essa progressão não se estabeleça necessariamente de forma linear ou universal a todos os organismos vegetais (DAYRELL *et al.*, 2018; BARTON, 2024). É importante diferenciar os estágios de desenvolvimento das fases fenológicas, que correspondem a eventos biológicos recorrentes do ciclo de vida associados a condições ambientais e sazonais.

Ao longo desse desenvolvimento, as plantas apresentam variações intraindividuais significativas em características anatômicas, morfológicas, fisiológicas e arquiteturas. Essas variações resultam da interação entre programas genéticos de mudança de fase, o aumento progressivo de idade e tamanho do organismo e a plasticidade fenotípica frente às condições ambientais (QUINTERO; BOWERS, 2012; RAVEN; EVERT; EICHHORN, 2014).

Essas transformações influenciam diretamente as estratégias funcionais das plantas, promovem alterações graduais na taxa de crescimento, na utilização de recursos e na tolerância a diferentes condições ecológicas ao longo do ciclo de vida. Nesse contexto, a ontogenia química emerge como um componente central na organização dos sistemas biológicos, uma vez que a composição metabólica dos organismos vegetais é continuamente modulada durante o desenvolvimento, refletindo adaptações fisiológicas e ecológicas que acompanham as diferentes fases ontogenéticas (HÉRAULT *et al.*, 2011; BARTON, 2024). A ontogenia química distingue-se da ontogenia no sentido amplo, por concentrar as análises especificamente na dinâmica do metabolismo especializado ao longo do desenvolvimento.

Alterações qualitativas e quantitativas na produção de metabólitos especializados representam uma importante expressão da ontogenia vegetal, uma vez que acompanham mudanças fisiológicas, ecológicas e funcionais que ocorrem ao longo das diferentes fases do desenvolvimento. À medida que as plantas transitam por estágios ontogenéticos, como germinação, crescimento vegetativo, maturidade reprodutiva e senescência, modificam-se os padrões de crescimento, as demandas por recursos e os modos de interação com o ambiente. Nesse contexto, a regulação temporal da biossíntese de metabólitos especializados atua como mecanismo de adaptação, modulando respostas a estímulos bióticos e abióticos e contribuindo para a plasticidade fenotípica das plantas (BOEGE; MARQUIS, 2005; FELISBERTO *et al.*, 2024; LAWRENCE-PAUL; LASKY, 2024).

Essas variações metabólicas influenciam diretamente processos fisiológicos e interações ecológicas, com implicações para a dinâmica de populações e comunidades biológicas (MÜLLER; JUNKER, 2022). Alterações no perfil químico ao longo do desenvolvimento podem determinar, por exemplo, padrões de herbivoria, ao favorecer o acúmulo de substâncias de defesa em determinados estágios ontogenéticos, bem como influenciar a atração de polinizadores e a estruturação de comunidades microbianas associadas às plantas (BOEGE; MARQUIS, 2005; BOSE *et al.*, 2025). Folhas jovens, por exemplo, frequentemente apresentam maior produção de metabólitos defensivos nos estágios iniciais de expansão foliar, estratégia que reduz a herbivoria e contribui para o sucesso do estabelecimento da planta (COLEY, 1983; FELISBERTO *et al.*, 2024).

Essas interações, contudo, não dependem apenas da variação ontogenética em sentido amplo, mas também da identidade do órgão ou tecido considerado, da fase fenológica em que se encontra a planta e do contexto ambiental em que essas respostas são expressas. Como resultado, a dinâmica dos metabólitos especializados apresenta caráter órgão-específico, estágio-específico e ambiente-dependente. Diferentes tecidos vegetais apresentam perfis metabólicos distintos, o que pode favorecer a colonização por comunidades microbianas específicas, evidenciando a estreita relação entre composição química vegetal e biodiversidade microbiana associada (LAWRENCE-PAUL; LASKY, 2024; BOSE *et al.*, 2025).

As mudanças ontogenéticas também se refletem em variações estruturais e bioquímicas dos tecidos vegetais. Ao longo do desenvolvimento, alterações nas concentrações de lignina e de metabólitos especializados como derivados fenólicos modificam propriedades químicas e estruturais dos tecidos. Essas variações influenciam processos ecológicos fundamentais, como as taxas de decomposição e mineralização da matéria orgânica, frequentemente relacionadas à proporção de carbono e nitrogênio presente nos resíduos vegetais (CHAPIN; MATSON; MOONEY, 2002; KUROKAWA *et al.*, 2022). Dessa forma, as transformações metabólicas associadas ao desenvolvimento das plantas podem afetar a ciclagem de nutrientes e, conseqüentemente, contribuir para a regulação do funcionamento dos ecossistemas.

Do ponto de vista aplicado, a variação ontogenética na produção de metabólitos especializados possui grande relevância para áreas como biotecnologia, farmacognosia e desenvolvimento de produtos naturais. Uma mesma espécie vegetal pode apresentar perfis distintos de flavonoides, alcaloides e terpenos ao longo do seu ciclo de vida, uma vez que a expressão das vias biossintéticas responsáveis por esses compostos é regulada por fatores genéticos, fisiológicos e ambientais associados ao estágio de desenvolvimento. Conseqüentemente, essas variações podem influenciar a eficácia terapêutica de extratos vegetais e o rendimento de compostos de interesse farmacológico (HÉRAULT *et al.*, 2011; DE BRITO-MACHADO *et al.*, 2022; BARTON, 2024; FELISBERTO *et al.*, 2024).

Desta forma, pode-se caracterizar uma janela ontogenética como o intervalo do desenvolvimento em que determinadas vias metabólicas ou classes de metabólitos de interesse farmacológico apresentam máxima concentração. Nesse contexto, a identificação da janela ontogenética constitui um parâmetro crítico para a definição do ponto de colheita. Essa abordagem permite otimizar o aproveitamento dos recursos vegetais e contribuir tanto para a redução de custos quanto para a padronização de matérias-primas destinadas à indústria farmacêutica e de fitoterápicos.

Dessa forma, a ontogenia química emerge como um campo integrador que articula dimensões ecológicas, evolutivas e tecnológicas do metabolismo vegetal. A compreensão das variações metabólicas ao longo do desenvolvimento das plantas permite não apenas elucidar mecanismos de adaptação e interação ecológica, mas também ampliar o potencial de exploração sustentável da biodiversidade vegetal para fins biotecnológicos e farmacológicos. Nesse contexto, este capítulo discute os fundamentos conceituais da ontogenia química, os fatores que modulam as variações metabólicas ao longo do desenvolvimento vegetal e as principais abordagens analíticas utilizadas para investigar essas mudanças, destacando sua relevância para o avanço das pesquisas em produtos naturais e ecologia química.

PERSPECTIVAS CONCEITUAIS DA ONTOGENIA QUÍMICA

O estudo da diversidade metabólica das plantas envolve diferentes áreas do conhecimento que, embora inter-relacionadas, apresentam perguntas científicas e abordagens metodológicas próprias. Entre as principais destacam-se a biossíntese vegetal, a metabolômica e a ecologia química, que contribuem de maneira complementar para a compreensão do metabolismo vegetal. Em conjunto, essas áreas permitem investigar *como* os metabólitos são produzidos, *o que* é produzido e *em que quantidade*, bem como *por que* e *para que* esses compostos participam das interações ecológicas. A ontogenia química integra essas perspectivas ao acrescentar uma dimensão temporal, evidenciando *quando* essas transformações metabólicas ocorrem ao longo do desenvolvimento das plantas.

A base dessa progressão é estabelecida pela **biossíntese vegetal**, campo que investiga os processos químicos nos organismos vegetais, com ênfase na compreensão das reações metabólicas responsáveis pela síntese e transformação de metabólitos. Sua abordagem, predominantemente mecanicista, envolve a elucidação de rotas biossintéticas, a caracterização de enzimas e de seus mecanismos catalíticos, bem como a identificação dos processos regulatórios que controlam o fluxo metabólico (COLEY; BARONE, 1996; AZMIN *et al.*, 2022). A modulação e expressão das vias metabólicas podem ser orientadas por determinados estágios de desenvolvimento enquanto, em alguns casos, a biossíntese de metabólitos desempenha papel na regulação, proteção e progressão do desenvolvimento vegetal.

A **metabolômica**, por sua vez, corresponde à análise abrangente do conjunto de metabólitos presentes em um sistema biológico em um determinado momento. Ela se dedica à identificação e quantificação em larga escala do conjunto completo de metabólitos de baixo peso molecular presentes em um organismo, tecido ou célula — o chamado metaboloma. A metabolômica fornece um retrato funcional direto do estado fisiológico de uma planta, refletindo o resultado das interações entre sua constituição genética, a regulação gênica e as influências ambientais

(SALAM *et al.*, 2023). Diferentemente da ontogenia química, que enfatiza mudanças ao longo do desenvolvimento, a metabolômica concentra-se na caracterização do estado metabólico de um sistema em condições específicas (MANICKAM *et al.*, 2023).

A metabolômica destaca-se como uma abordagem de alta abrangência voltada à caracterização simultânea de numerosos metabólitos em amostras biológicas complexas, sendo particularmente útil para revelar assinaturas químicas associadas a estados fisiológicos, condições ambientais e fases do desenvolvimento. Embora em muitos contextos, sua aplicação isolada resulte na descrição de padrões de variação e correlação metabólica, sem acesso direto aos mecanismos causais subjacentes, essa limitação não é intrínseca à abordagem. Quando associada a delineamentos experimentais rigorosos, validação estatística apropriada e integração com dados transcriptômicos, proteômicos, fisiológicos e ecológicos, a metabolômica passa a oferecer suporte relevante para a formulação e teste de hipóteses mecanísticas, contribuindo para a compreensão funcional da regulação biossintética, da plasticidade metabólica e do papel biológico dos metabólitos especializados.

Paralelamente, a **ecologia química** se insere como um campo de estudo dedicado à compreensão funcional dos metabólitos, investigando seu papel como mediadores de interações ecológicas e sua influência em processos como defesa contra herbívoros, atração de polinizadores, comunicação entre organismos e estabelecimento de associações com microrganismos. Nesse contexto, constitui o campo do conhecimento voltado à análise de como metabólitos especializados participam das interações entre organismos e destes com o ambiente (VAN DAM; VAN DER MEIJDEN, 2011), tendo como questão central a função desses compostos nas interações biológicas.

O advento de técnicas ômicas, particularmente da metabolômica, ampliou significativamente o ferramental disponível para a identificação de princípios ativos em contextos ecológicos.

A metabolômica comparativa, em especial, permite monitorar alterações globais no perfil metabólico de organismos submetidos a diferentes condições ecológicas ou estados fisiológicos, viabilizando a identificação de compostos candidatos a mediar interações específicas sem a necessidade de fracionamento prévio. Estudos baseados em abordagens metabolômicas não direcionadas têm demonstrado, por exemplo, que ataques de herbívoros podem induzir reprogramações metabólicas amplas em plantas, resultando na produção diferencial de metabólitos em diferentes tecidos e compartimentos do organismo vegetal, alguns dos quais podem exercer efeitos distintos sobre o próprio herbívoro ou sobre outras interações ecológicas associadas (VAN DAM; VAN DER MEIJDEN, 2011; MARTI *et al.*, 2013).

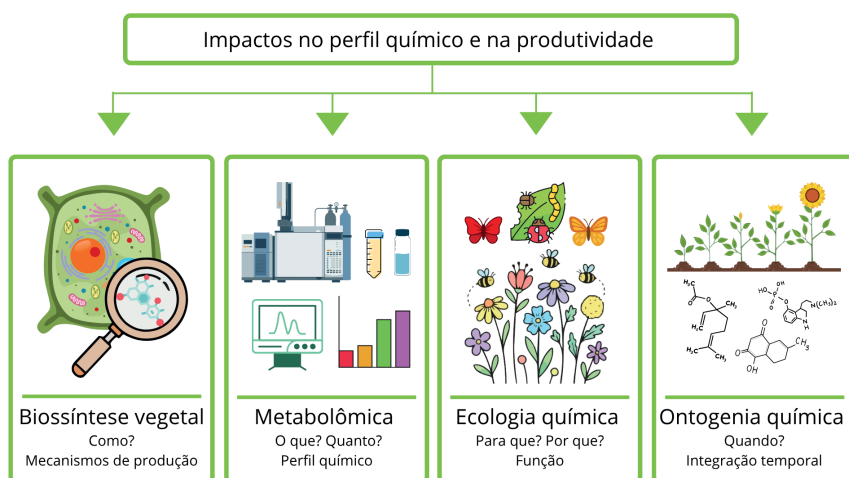
As interações entre plantas e outros organismos são frequentemente mediadas por alterações no repertório metabólico vegetal. Diferentes desafios, como estresse ambiental, infecção por patógenos ou herbivoria, podem induzir

mudanças qualitativas e quantitativas em metabólitos primários e especializados. Nesse contexto, abordagens de metabolômica comparativa têm sido amplamente empregadas na ecologia química para identificar padrões metabólicos associados a essas interações e revelar moléculas potencialmente envolvidas na mediação dessas respostas (KUHLSCH; POHNERT, 2015).

As interações ecológicas mediadas por metabólitos vegetais não são estáticas, mas variam ao longo do desenvolvimento dos organismos. Diferentes estágios ontogênicos podem apresentar perfis metabólicos distintos, o que implica que a função ecológica desses compostos também pode se modificar ao longo do ciclo de vida das plantas (DE BRITO-MACHADO *et al.*, 2022; FELISBERTO *et al.*, 2024).

Nesse contexto, emerge o conceito de **ontogenia química** que se refere ao conjunto de variações qualitativas e quantitativas no metabolismo de um organismo ao longo de seu desenvolvimento, resultantes da interação entre programas genéticos de mudança de fase, alterações fisiológicas associadas ao crescimento e respostas plásticas às condições ambientais. Essas transformações envolvem modificações tanto no metabolismo central quanto no metabolismo especializado, refletindo a reorganização funcional dos sistemas biológicos à medida que o organismo transita entre diferentes estágios ontogenéticos (DAYRELL *et al.*, 2018; BARTON, 2024). Assim, a ontogenia química investiga a dimensão temporal da diversidade metabólica. A figura 1 apresenta um esquema integrador contemplando diferentes campos do conhecimento.

Figura 1 - Questões fundamentais no estudo da química vegetal



Legenda: Biossíntese vegetal, metabolômica e ecologia química fornecem, respectivamente, as bases mecanística, analítica e funcional dos metabólitos, enquanto a ontogenia química integra essas dimensões ao longo do desenvolvimento, revelando a dinâmica temporal do perfil químico. Fonte: Elaborada pelos autores.

A relevância da ontogenia química pode ser evidenciada por estudos empíricos que demonstram variações no perfil metabólico ao longo do desenvolvimento vegetal. Em *Piper rivinoides* Kunth (Piperaceae), por exemplo, a composição do óleo essencial foi avaliada em diferentes estágios ontogenéticos considerando o porte das plantas, o qual, embora frequentemente utilizado como indicador de desenvolvimento, não corresponde de forma precisa à idade cronológica ou à fase ontogenética. Os resultados indicaram mudanças significativas tanto na diversidade quanto na abundância dos metabólitos ao longo do desenvolvimento, com predominância de arilpropanoides em indivíduos jovens e maior diversidade de monoterpenos e sesquiterpenos em plantas adultas. Esses achados evidenciam que a identidade química vegetal não é estática, mas dinamicamente modulada ao longo da ontogenia, o que possui implicações diretas para estratégias de coleta e para a exploração do potencial biotecnológico e farmacológico das espécies (FELISBERTO; RAMOS; MOREIRA, 2023).

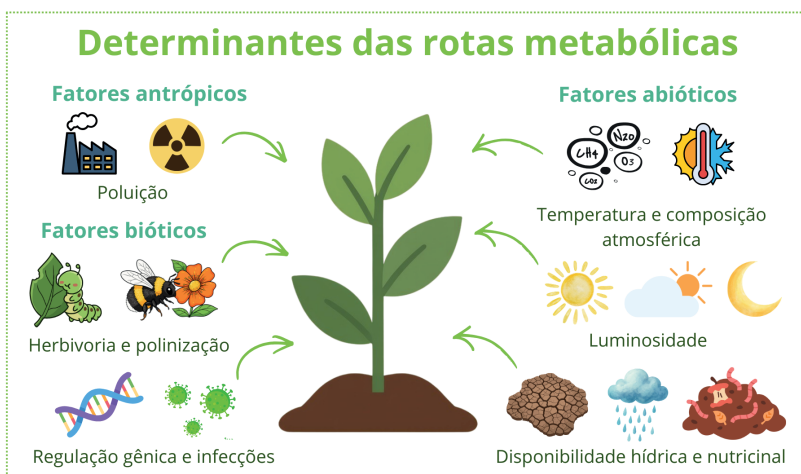
Em conjunto, essas diferentes abordagens evidenciam que a diversidade metabólica vegetal deve ser compreendida a partir de perspectivas complementares e um contexto dinâmico de desenvolvimento. Enquanto a bioquímica vegetal elucida os mecanismos biossintéticos responsáveis pela produção dos metabólitos, a metabolômica permite caracterizar os perfis químicos presentes nos organismos vegetais e a ecologia química investiga as funções desses compostos nas interações entre plantas e outros organismos. A ontogenia química integra essas dimensões ao introduzir a perspectiva temporal do desenvolvimento, demonstrando que tanto a produção quanto a função ecológica dos metabólitos podem variar ao longo do ciclo de vida das plantas. Dessa forma, compreender a dinâmica ontogenética da diversidade metabólica torna-se fundamental para interpretar a plasticidade química vegetal e suas implicações ecológicas, evolutivas e aplicadas.

DINÂMICA ONTOGENÉTICA E IMPLICAÇÕES ECOLÓGICAS

A classificação dos metabólitos especializados pode ser abordada sob diferentes perspectivas, que, embora complementares, refletem níveis distintos de organização. Do ponto de vista biossintético, a organização dos metabólitos especializados reflete a origem de rotas metabólicas centrais como as vias do ácido chiquímico, dos fenilpropanoides, do acetato/malonato, do ácido mevalônico (MVA) e do fosfato de metileritritol (MEP), além de rotas derivadas de aminoácidos e de ácidos graxos. Entretanto, diversos metabólitos são produzidos a partir de interconexões entre vias, evidenciando que uma organização estrutural não está associada necessariamente a uma única via biossintética. Estruturalmente, esses compostos podem ser organizados em grandes grupos, como fenólicos, terpenos, compostos nitrogenados e compostos contendo enxofre, cujas propriedades químicas se relacionam com suas funções

ecológicas e fisiológicas. Assim, a diversidade estrutural dos metabólitos especializados está diretamente relacionada às suas propriedades funcionais como defesa, adaptação, sinalização, alelopatia, proteção oxidativa e interações ecológicas sob condições ambientais adversas (ERB; KLIEBENSTEIN, 2020) (Figura 2).

Figura 2 - Fatores determinantes das rotas metabólicas



Legenda: Fatores antrópicos, bióticos e abióticos modulam a atividade metabólica vegetal, resultando em variações no perfil químico. Fonte: Elaborada pelos autores.

Estudos moleculares demonstraram que o metabolismo especializado é rigidamente controlado em níveis espacial e temporal, sendo altamente responsivo a estímulos ambientais e ao estágio de desenvolvimento, por meio de mecanismos regulatórios que incluem controle transcricional, modulação enzimática e reorganização do fluxo metabólico (MÜLLER; JUNKER, 2022; RAMOS *et al.*, 2022; DIXON; DICKINSON, 2024).

Ao longo do desenvolvimento ontogenético, o metabolismo especializado das plantas passa por reprogramações dinâmicas que se manifestam tanto pela substituição de classes químicas quanto por variações quantitativas em substâncias específicas. A regulação dessas rotas metabólicas resulta da integração de múltiplos determinantes: (1) *fatores abióticos*, incluindo temperatura, luminosidade, disponibilidade hídrica e nutricional, salinidade e condições atmosféricas; (2) *fatores bióticos*, como o controle genético e os estados fisiológicos do organismo; herbivoria, infecções por patógenos, interações com o microbioma, interações com polinizadores; e (3) *fatores antrópicos*, como poluentes e agentes elicitores. Em conjunto, esses elementos modulam o fluxo metabólico e determinam a plasticidade do perfil químico ao longo do desenvolvimento vegetal, desde sua origem biossintética até suas implicações funcionais e ecológicas. (BUCHANAN *et al.*, 2015).

No âmbito dos determinantes intrínsecos, os fatores genéticos estabelecem a capacidade biossintética das plantas de produzir perfis químicos específicos, sendo o genótipo um elemento central na definição da composição e da quantidade de metabólitos especializados. Variações intra e interespecíficas decorrem da regulação diferencial de genes biossintéticos mediada por fatores de transcrição e pela interação entre genótipo e ambiente (KESSLER; KALSKE, 2018). Além disso, a especificidade de órgão e tecido acrescenta uma camada adicional de regulação, resultando em perfis metabólicos distintos entre folhas, caules e raízes, como demonstrado em *Reynoutria japonica* Houtt. (Polygonaceae), cujos clusters metabólicos refletem padrões diferenciais de expressão gênica (WANG *et al.*, 2021). Desta forma, embora o genótipo seja um elemento norteador, não é o único aspecto que determina as variações químicas de uma espécie, mas integra uma regulação altamente dinâmica, na qual diferentes interações, tecidos e estágios de desenvolvimento expressam repertórios metabólicos específicos.

A análise de determinantes abióticos permite identificar importantes moduladores da atividade biossintética vegetal, que frequentemente operam como estressores, exigindo ajustes fisiológicos e metabólicos para garantir sua sobrevivência. A temperatura, por exemplo, pode induzir respostas como senescência precoce e alterações na densidade estomática, conforme observado em *Arabidopsis* Heynh. (Brassicaceae) (KIM *et al.*, 2020), além de influenciar a produção de metabólitos especializados, como alcaloides e terpenos. De modo complementar, variações circadianas de temperatura e luminosidade promovem reorganizações na expressão gênica e na composição química ao longo do dia, evidenciando a plasticidade metabólica frente a flutuações ambientais, conforme observado em estudos sobre a composição de óleos essenciais em diferentes espécies vegetais (PEREIRA *et al.*, 2018; DOS SANTOS *et al.*, 2020; RAMOS *et al.*, 2021; GARGI *et al.*, 2025).

A luminosidade, por sua vez, desempenha um papel fundamental não apenas na fotossíntese, mas também na regulação da biossíntese de metabólitos especializados. Tanto a intensidade quanto a qualidade espectral da radiação modulam o acúmulo dessas moléculas, como observado em *Ipomoea batatas* (L) Lam. (Convolvulaceae), sob maior tempo de exposição luminosa (CARVALHO *et al.*, 2010). Alterações na composição atmosférica, incluindo aumento de CO₂ e variações na radiação Ultravioleta (UV), intensificam esse cenário, promovendo respostas metabólicas compensatórias. A irradiação UV-B, por exemplo, elevou a produção de vindolina e catarantina em culturas celulares de *Catharanthus* G. Don (Apocynaceae) (RAMANI; JAYABASKARAN, 2008), enquanto concentrações elevadas de CO₂ têm sido associadas ao incremento de diferentes classes metabólicas (JAMLOKI *et al.*, 2021).

A disponibilidade hídrica constitui outro fator crítico que afeta diretamente o ciclo de vida do reino vegetal, influenciando processos morfológicos, fisiológicos e bioquímicos (OSAKABE *et al.*, 2014; AMBROSIO *et al.*, 2024). A disponibilidade de água pode ser percebida pelo potencial hídrico do solo, umidade atmosférica e regime pluviométrico. Condições de déficit hídrico frequentemente induzem o aumento da síntese de flavonoides, terpenos e outros compostos antioxidantes, configurando mecanismo adaptativo, como observado em *Cuminum cyminum* L. (Apiaceae) (GHASEMI *et al.*, 2023). Em contraste, elevada irrigação pode reduzir a densidade de tricomas e o teor relativo de óleos essenciais e outros metabólitos, como demonstrado em *Ocimum basilicum* L. (Lamiaceae) (RADACSI *et al.*, 2020). A disponibilidade hídrica também se encontra funcionalmente integrada ao estado nutricional, regulando a absorção e o transporte de minerais, conseqüentemente, impactando o metabolismo especializado, como evidenciado em *Sorghum bicolor* (L.) Moench (Poaceae) (CUNHA *et al.*, 2024).

Na agricultura, a nutrição mineral não altera somente o metabolismo central, mas também o metabolismo especializado. A disponibilidade de macronutrientes como nitrogênio, fósforo e potássio pode promover tanto aumentos quanto reduções na produção de metabólitos especializados (GOBBO-NETO; LOPES, 2007). De modo geral, a limitação nutricional favorece o acúmulo de derivados fenólicos como estratégia adaptativa, enquanto restrições de nitrogênio e enxofre tendem a reduzir metabólitos que incorporam esses elementos como alcaloides e glucosinolatos, embora efeitos de diluição associados ao crescimento também devam ser considerados.

Por fim, a salinidade ambiental atua como fator estressor ao induzir desidratação celular e desequilíbrios osmóticos e iônicos, comprometendo a homeostase e impactando o metabolismo especializado. Em algumas espécies, observa-se aumento na produção de antocianinas como resposta antioxidante e fotoprotetora, enquanto em espécies mais sensíveis pode ocorrer redução nos teores desses pigmentos, evidenciando que a resposta metabólica depende da tolerância ao estresse salino (MANSOUR, 2023).

Além de determinantes genéticos e abióticos, a ontogenia vegetal é fortemente modulada por interações bióticas, entre as quais a herbivoria se destaca como pressão seletiva recorrente. Nesse contexto, a evolução de adaptações químicas constitui uma estratégia de defesa, que se soma às barreiras físicas iniciais. Os metabólitos especializados podem atuar tanto de forma constitutiva quanto induzida. As defesas constitutivas representam o investimento preventivo, garantindo proteção imediata contra herbívoros, ainda que impliquem custo metabólico. Muitas espécies mantêm níveis basais de metabólitos como alcaloides, terpenoides, fenólicos e glicosinolatos previamente acumulados nos tecidos, mesmo na ausência de ataque. Esse padrão reflete um ajuste evolutivo associado a cenários de herbivoria frequente e previsível (BUCHANAN *et al.*, 2015).

Em contraste, as defesas induzidas são ativadas em resposta direta à interação, configurando padrões moleculares associados a herbívoros (HAMPs) como sinais provenientes da saliva ou de fluido de oviposição (TAIZ *et al.*, 2023). Diferentemente de danos mecânicos inespecíficos, a herbivoria também desencadeia o reconhecimento de padrões moleculares associados a dano (DAMPs), que ativam cascatas sinalizadoras endógenas. Como consequência, ocorre o redirecionamento de recursos do crescimento para vias defensivas, conforme previsto pelo modelo de balanço crescimento–defesa (HERMS; MATTSON, 1992). Metabólitos como taninos, cumarinas e saponinas atuam como dissuasores alimentares, enquanto fitormônios como ácido jasmônico e etileno regulam a síntese de metabólitos especializados, promovendo respostas que incluem toxicidade, redução da digestibilidade e atração de inimigos naturais dos herbívoros (TAIZ *et al.*, 2023). Essa distinção evidencia que a ontogenia química não se limita a mudanças passivas ao longo do desenvolvimento, mas envolve ajustes metabólicos estratégicos em resposta a pressões seletivas.

Além das respostas locais, plantas são capazes de estabelecer comunicação química tanto intra quanto interespecífica. Compostos voláteis liberados no ambiente atuam como sinais aéreos, permitindo que plantas vizinhas antecipem respostas defensivas. Metil salicilato, por exemplo, está envolvido na sinalização de infecções, enquanto estrigolactonas atuam nas rizosferas, desempenhando papel na comunicação com fungos micorrízicos e, em alguns casos, estimulando a germinação de plantas parasitas. Em interações competitivas, metabólitos como fenólicos voláteis podem exercer efeitos alelopáticos, inibindo o crescimento de espécies adjacentes (KONG *et al.*, 2019). Em sistemas de monocultura, a acumulação desses metabólitos pode levar à alelopatia intraespecífica, com impactos negativos sobre a produtividade agrícola.

Adicionalmente, plantas enfrentam infecções por microrganismos fitopatógenos, o que demanda respostas químicas específicas. As interações planta-patógenos podem ser compatíveis ou incompatíveis, dependendo da eficácia das defesas químicas do hospedeiro (WINK, 2010). Entre os metabólitos envolvidos, alcaloides frequentemente desempenham papel relevante na resistência contra fungos e bactérias; em *Liriodendron* (L.) (Magnoliaceae), por exemplo, a liriodenina está associada ao controle de infecções fúngicas (HUANG; DUDAREVA, 2023). Embora as plantas tenham desenvolvido mecanismos de defesa, herbívoros e patógenos acompanham esse processo por meio da evolução de mecanismos de tolerância ou detoxificação, exibindo um processo dinâmico de coevolução entre plantas e seus antagonistas (EHRlich; RAVEN, 1964).

Por fim, a manutenção das espécies vegetais não depende apenas da sobrevivência frente a estressores, mas também da eficiência reprodutiva e da dispersão. Nesse contexto, metabólitos especializados desempenham papel fundamental na atração

de polinizadores, especialmente em angiospermas. A biossíntese de pigmentos como carotenoides e flavonoides, incluindo antocianidinas, cianidinas e delphinidinas, constitui uma importante inovação adaptativa, contribuindo para a sinalização visual e o sucesso reprodutivo das plantas.

Modificações químicas nos pigmentos modulam os diferentes tons observados nas pétalas (HARBORNE, 1993). O espectro refletido pode direcionar preferencialmente determinados visitantes uma vez que diferentes polinizadores apresentam capacidades visuais distintas, por exemplo, as abelhas melíferas (*Apis mellifera*) percebem comprimentos de onda mais curtos, incluindo o ultravioleta, enquanto algumas aves possuem visão tetracromática, abrangendo desde o ultravioleta até comprimentos de onda mais longos como o vermelho (LUNAU; CAMARGO; REN, 2025). Essas interações ecológicas impactam diretamente o desenvolvimento das espécies vegetais, especialmente aquelas de maior interação com polinizadores migratórios. Em algumas espécies, é possível observar alteração da coloração após a visitação, redirecionando o polinizador para flores ainda não exploradas e aumentando a eficiência da polinização cruzada. Adicionalmente, estruturas visuais especializadas, como guias de néctar, atuam como sinais direcionais que conduzem o visitante à região reprodutiva da flor, maximizando o contato com anteras e estigmas e, conseqüentemente, o sucesso reprodutivo.

Igualmente relevantes, os voláteis florais desempenham importante papel na mediação das interações planta–polinizador. A emissão de aromas orgânicos voláteis, como terpenoides, benzenoides e derivados de ácidos graxos, atua como sinal químico à distância, orientando polinizadores até a fonte de recurso mesmo antes do contato visual com a flor (RAGUSO, 2008).

Além dos atrativos olfativo e visual, o néctar constitui elemento central da polinização, atuando não apenas como recurso nutricional, mas também como modulador da interação planta–polinizador, uma vez que odor e sabor podem influenciar a seletividade de visitantes específicos. Em diferentes sistemas estudados, a composição química do néctar varia conforme preferências de espécies polinizadoras, refletindo um tipo de adaptação ecológica que vai além de uma “moeda de troca”, pois pode afetar tanto a eficiência de polinização quanto a manutenção das populações dos próprios polinizadores (SILVA *et al.*, 2020).

Essas abordagens não são apenas classificatórias, mas definem diferentes formas de interpretar a diversidade química vegetal. Em geral, a ontogenia química é caracterizada como um campo interdisciplinar que articula biossíntese vegetal, ecologia química, fisiologia vegetal e biologia do desenvolvimento, buscando variações qualitativas e quantitativas do metabolismo especializado ao longo do ciclo de vida dos organismos, articulando níveis moleculares, fisiológicos e ecológicos.

CONTRIBUIÇÕES METODOLÓGICAS E ABORDAGENS ANALÍTICAS

A caracterização do perfil químico de espécies vegetais pode ser conduzida por diferentes abordagens analíticas, que variam desde a identificação de metabólitos individuais até a análise integrada de redes metabólicas. Tradicionalmente, essa investigação baseia-se na análise dos produtos do metabolismo especializado por meio de etapas de extração, separação cromatográfica e detecção espectrométrica. No entanto, avanços recentes têm ampliado esse escopo ao incorporar abordagens sistêmicas, nas quais o metabolismo é compreendido como uma rede dinâmica, regulada espacial e temporalmente, e altamente responsiva a estímulos ambientais e ao desenvolvimento vegetal, conforme destacado por Dixon e Dickinson (2024). Nesse contexto, a análise química deixa de ser meramente descritiva e passa a integrar uma perspectiva funcional e sistêmica.

Para reduzir a sobreposição de sinal, a separação cromatográfica dos metabólitos constitui etapa essencial para reduzir a complexidade da matriz vegetal. A escolha da técnica depende diretamente das propriedades físico-químicas dos analitos, como volatilidade, estabilidade térmica e polaridade. A cromatografia gasosa é amplamente empregada para compostos voláteis e termoestáveis de baixa a média polaridade, como monoterpenos e compostos aromáticos, podendo também ser aplicada, mediante derivatização, a classes como açúcares, ácidos graxos e esteróis (ADEEYO *et al.*, 2024). Em contrapartida, metabólitos não voláteis, termolábeis e com alta polaridade como alcaloides e compostos fenólicos são preferencialmente analisados por cromatografia líquida. Embora essas técnicas sejam fundamentais para a separação e detecção, Dixon e Dickinson (2024) ressaltam que o verdadeiro avanço no campo reside na capacidade de integrar essas informações com o contexto biológico em que os metabólitos são produzidos e acumulados.

A identificação estrutural dos metabólitos é predominantemente realizada por analisadores de espectrometria de massa (MS), os quais fornecem informações sobre razão massa/carga (m/z) e padrões isotópicos e de fragmentação característicos, possibilitando a inferência da massa molecular neutra (MCLAFFERTY; TURECEK, 1993). Contudo, a atribuição estrutural depende frequentemente da comparação com padrões analíticos ou bibliotecas espectrais, o que limita a identificação de metabólitos ainda desconhecidos. Nesse cenário, a ressonância magnética nuclear (RMN) assume papel complementar essencial, especialmente na elucidação de novas estruturas, ao fornecer informações detalhadas sobre conectividade e estereoquímica. Técnicas espectroscópicas adicionais, como Ultravioleta-Visível (UV-Vis) e infravermelho, contribuem com informações sobre grupos funcionais e sistemas cromóforos, ampliando a robustez da caracterização química.

No que se refere à quantificação, a intensidade do sinal detectado é proporcional à concentração do analito, sendo a escolha do detector dependente das propriedades físico-químicas da classe de metabólitos analisada (NICOLESCU, 2017) (Tabela 1). Terpenos voláteis são frequentemente quantificados por detectores de ionização em chama enquanto metabólitos não voláteis, como alcaloides, que contêm cromóforos em sua estrutura são melhor quantificados por detectores de arranjo de diodos. Outros detectores, como fluorescência, índice de refração, espalhamento de luz evaporativo e espectrometria de massas, ampliam as possibilidades analíticas conforme a natureza dos compostos. Ainda assim, a quantificação em matrizes vegetais complexas permanece desafiadora devido a efeitos de matriz e variações na eficiência de ionização, especialmente em sistemas baseados em MS.

Tabela 1: Contribuição de detectores na análise de ontogenia vegetal

Detector	Contribuição
Ionização em chama	Ideal em monitoramento de estágios com variações quantitativas de voláteis. Exemplo: alteração no perfil de voláteis associada à transição do estágio vegetativo para o reprodutivo.
Arranjo de diodo	Permite o mapeamento do acúmulo de metabólitos com sistemas conjugados associados à maturação ou proteção tecidual. Exemplo: aumento diferencial de fenólicos em tecidos jovens em comparação com tecidos senescentes.
Fluorescência	Útil em detectar metabólitos específicos com baixas concentrações em estágios iniciais ou em respostas discretas. Exemplo: variação de cumarinas em tecidos meristemáticos.
Índice de refração	Útil em análise de estágios com redistribuição de recurso energético. Exemplo: translocação de açúcares das folhas para frutos durante o processo de maturação.
Espalhamento de luz evaporativo	Ideal em análise de variação lipídica. Exemplo: análise de deposição progressiva de ceras cuticulares.
Massa	Permite o rastreamento da dinâmica de vias biossintéticas ao longo da ontogenia. Exemplo: conversão de precursores em metabólitos especializados em diferentes estágios.

A acoplagem entre cromatografia líquida e espectrometria de massas (LC-MS) representa uma ferramenta mais robusta para análise de metabólitos em matrizes complexas, permitindo identificação putativa e quantificação simultânea com base na razão m/z e na intensidade do sinal (Li *et al.*, 2023). Entretanto, embora a MS ofereça elevada sensibilidade e seletividade, sua aplicação quantitativa apresenta limitações inerentes, uma vez que a detecção ocorre no nível de íons, e não da molécula neutra. Em fontes de ionização por *eletrospray* (ESI), efeitos de matriz, como a supressão iônica, podem comprometer a exatidão dos resultados, especialmente em extratos vegetais complexos, nos quais diferentes metabólitos competem pelo processo de ionização.

Uma análise mais refinada pode ser feita por LC-MS/MS, ao introduzir um segundo nível de análise baseado na fragmentação controlada dos íons precursores. Essa abordagem aumenta a seletividade e a confiabilidade na identificação, permitindo distinguir compostos isobáricos por meio de seus padrões de fragmentação específicos, além de aprimorar a robustez da quantificação (XIAO; ZHOU; RESSOM, 2012). Assim, metabólitos com massas idênticas podem ser diferenciados com base em seus perfis espectrais, ampliando a resolução analítica em matrizes altamente complexas.

Técnicas complementares, como microscopia Raman e RMN em escala microscópica, também têm contribuído para a análise espacial e dinâmica de metabólitos, ainda que com limitações de sensibilidade ou resolução. Além disso, estratégias baseadas em biossensores geneticamente codificados e sondas fluorescentes têm possibilitado a visualização indireta ou direta de pequenas moléculas em tempo real, especialmente no caso de fitormônios. Embora tais abordagens ainda sejam limitadas para metabólitos especializados não hormonais, devido à escassez de informações sobre seus receptores e mecanismos de reconhecimento.

De forma geral, a análise química de metabólitos vegetais pode ser compreendida como um processo integrado que envolve três etapas complementares: (1) separação cromatográfica da matriz, (2) detecção instrumental baseada em propriedades físico-químicas específicas e (3) interpretação dos dados para identificação e quantificação dos metabólitos. No entanto, conforme destacado por Dixon e Dickinson (2024), a compreensão do metabolismo especializado transcende a caracterização de metabólitos individuais, exigindo abordagens capazes de integrar essas informações em um contexto biológico mais amplo, considerando sua regulação, localização e função.

Nesse sentido, as tecnologias ômicas, em especial a metabolômica, emergem como abordagem central para a compreensão do metabolismo especializado em nível sistêmico. Diferentemente das abordagens analíticas tradicionais, o foco desloca-se dos produtos para a compreensão de como os metabólitos são produzidos, regulados e modulados em resposta a fatores genéticos, bióticos, abióticos e antrópicos. A metabolômica, ao integrar técnicas cromatográficas e espectrométricas com abordagens computacionais, permite a análise global do perfil metabólico, possibilitando a identificação de padrões dinâmicos e a inferência da ativação coordenada de vias biossintéticas. Essa perspectiva é particularmente relevante em estudos de estresse ambiental, nos quais alterações em metabólitos basais e especializados refletem estratégias adaptativas das plantas, conforme discutido por Salam *et al.* (2023).

A integração entre dados de metabolômica, transcriptômica e genômica amplia significativamente o poder interpretativo dessas análises, permitindo correlacionar expressão gênica com produção metabólica e inferir mecanismos regulatórios subjacentes (WANG *et al.*, 2024). Nesse contexto, ferramentas como redes moleculares, baseadas na similaridade estrutural inferida a partir de espectros MS/MS, e abordagens quimiométricas multivariadas tornam-se essenciais para a organização e visualização de grandes conjuntos de dados, permitindo a identificação de padrões e agrupamentos metabólicos (PINTO, 2017).

No contexto da ontogenia química, a quimiometria constitui um ferramental analítico central para a interpretação da dinâmica metabólica ao longo do desenvolvimento vegetal, permitindo integrar conjuntos de dados complexos e de alta dimensionalidade em uma perspectiva temporal. Métodos não supervisionados como a Análise de Componentes Principais (PCA) permitem reduzir a dimensionalidade dos dados, evidenciando padrões e agrupamento entre amostras utilizando, como variáveis, os perfis químicos. A Análise de Agrupamento Hierárquico (HCA) complementa essa abordagem ao construir dendrogramas que facilitam a visualização das similaridades químicas (FERREIRA, 2015).

Adicionalmente, métodos supervisionados, como Análise Discriminante por Mínimos Quadrados Parciais (PLS-DA), são empregados para maximizar a separação entre grupos previamente definidos (por exemplo, diferentes estágios ontogenéticos), permitindo identificar variáveis discriminantes (VIP scores) associadas a marcadores potenciais. No entanto, a PLS-DA requer estratégias rigorosas de validação para evitar sobreajuste (*overfitting*), especialmente em cenários com alta dimensionalidade e baixo número de amostras, sendo recomendada a aplicação de validação cruzada, testes de permutação, avaliação de métricas como R^2 e Q^2 , além de cautela na interpretação dos resultados (FERREIRA, 2015). Dessa forma, a quimiometria não apenas auxilia na visualização dos dados, mas viabiliza a construção de inferências robustas sobre a variação ontogenética do metabolismo, contribuindo para a identificação de padrões funcionais e para a definição de marcadores relevantes em contextos aplicados, como controle de qualidade e bioprospecção.

Quando aplicadas ao estudo da ontogenia química, essas abordagens assumem uma dimensão adicional ao incorporar explicitamente o eixo temporal na análise metabolômica. Nesse caso, a investigação deixa de ser pontual e passa a considerar variações qualitativas e quantitativas ao longo do desenvolvimento vegetal, permitindo identificar trajetórias metabólicas e mudanças progressivas no perfil químico. Conforme enfatizado por Dixon e Dickinson (2024), a distribuição espacial e temporal dos metabólitos é um componente fundamental para a compreensão de suas funções biológicas, sendo determinante para a interpretação de interações ecológicas e respostas adaptativas. Assim, o uso combinado de redes moleculares

e análises multivariadas possibilita não apenas descrever, mas também interpretar a dinâmica do metabolismo especializado ao longo do ciclo de vida das plantas, ampliando as perspectivas para aplicações biotecnológicas e ecológicas.

APLICAÇÕES EM PRODUTOS NATURAIS, QUALIDADE E BIOPROSPECÇÃO

A distinção de espécies vegetais é comumente realizada com base em semelhanças evolutivas, genéticas e morfoanatômicas. Entretanto, as rotas metabólicas apresentam padrões evolutivos ao longo do tempo que, somados à ontogenia química, podem determinar identidades intraespecíficas distintas. Substâncias bioativas, definidas por apresentarem atividade biológica comprovada, diferem de marcadores químicos que correspondem a substâncias com função analítica ou discriminante. Embora um mesmo ativo possa cumprir ambas as funções, essa sobreposição não é obrigatória, sendo comum que marcadores químicos não sejam os principais responsáveis pelo efeito farmacológico. Destaca-se ainda que marcadores taxonômicos são um subgrupo de marcadores químicos selecionados especificamente por sua capacidade de refletir relações evolutivas e auxiliar na delimitação de táxons. Assim, o uso de metabólitos especializados como marcadores taxonômicos consolidou-se como uma abordagem complementar à morfologia e, mais recentemente, à filogenômica.

No contexto da quimiotaxonomia, a seleção de marcadores químicos constitui uma etapa crítica que deve atender a critérios como relevância quantitativa, consistência de ocorrência, relativa estabilidade frente a variações ambientais e detectabilidade por métodos analíticos reprodutíveis. A quimiotaxonomia, nesse sentido, utiliza metabólitos especializados como caracteres auxiliares na delimitação de táxons, partindo do pressuposto de que determinados perfis químicos refletem relações evolutivas e podem complementar dados morfoanatômicos e filogenéticos. No entanto, essa abordagem apresenta limitações importantes, sobretudo por assumir relativa estabilidade do fenótipo químico, desconsiderando que o metaboloma vegetal é altamente plástico e condicionado por fatores como estágio de desenvolvimento, órgão analisado e condições ambientais. Como consequência, variações intraespecíficas podem ser interpretadas como diferenças taxonômicas de forma equivocada.

Nesse cenário, a quimiofenética surge rompendo com a perspectiva essencialmente estática da quimiotaxonomia ao considerar explicitamente a variabilidade espaço-temporal do fenótipo químico. Em vez de buscar apenas marcadores discriminantes entre táxons, a quimiofenética investiga como diferentes estados fenotípicos, resultantes da interação entre genótipo, ambiente e desenvolvimento, modulam os perfis metabólicos, permitindo interpretar a diversidade química como um

sistema dinâmico (RAMOS *et al.*, 2022). Essa abordagem contribui diretamente para estudos de ontogenia química ao fornecer o fundamento conceitual e analítico para compreender a necessidade das análises de variações metabólicas ao longo do desenvolvimento sem reduzi-las a ruído experimental ou variação indesejada.

Tradicionalmente, considera-se que a padronização química de uma espécie é analisada sob a óptica de um único ponto do seu ciclo de vida, desconsiderando que variações no seu desenvolvimento podem fornecer diversos perfis químicos. O perfil químico de um insumo vegetal não é invariável, mas condicionado pela fase fenológica e pelo estágio de desenvolvimento do órgão coletado como relatado para espécies do gênero *Hypericum* Toum. ex L. (Hypericaceae) (CIRAK *et al.*, 2022). Ainda que se utilizem tecnologias ômicas para caracterizar uma espécie, a precisão qualitativa e quantitativa das análises pode ser superestimadas ou subestimadas uma vez que metabólitos relevantes podem estar restritos a tecidos específicos ou a fases particulares do desenvolvimento. Essa plasticidade metabólica representa um ponto crítico para o controle de qualidade de produtos naturais, onde a ausência da análise de ontogenia química pode comprometer a comparabilidade interlotes. Amostras coletadas em diferentes estágios ontogenéticos podem apresentar variações de concentração significativas, comprometendo a reprodutibilidade farmacológica, especialmente quando pressupõe consistência composicional.

No âmbito da farmacognosia, a metabolômica assume papel crucial na autenticação de drogas vegetais que seguem critérios rigorosos determinados em compêndios farmacopéicos utilizando abordagens botânicas, morfoanatômicas e fitoquímicas (ADEEYO *et al.*, 2024). Diferenças na ontogenia química podem ser interpretadas equivocadamente como variação interespecífica quando o estágio de desenvolvimento não é considerado, o que compromete critérios de qualidade estabelecidos em monografias, ainda que o material botânico seja autêntico. Em contextos regulatórios e farmacopeicos, a correta delimitação da variabilidade intraespecífica é essencial para evitar classificações incorretas e garantir a autenticidade de matérias-primas e dos critérios de qualidade. Assim, em busca de protocolos farmacognósticos robustos, explicitar não apenas a parte vegetal utilizada, mas também a janela ontogenética recomendada para coleta e processamento é uma alternativa para garantia de autenticidade.

A incorporação de abordagens ômicas ampliou a capacidade de caracterização de perfis químicos vegetais, podendo ser conduzida por estratégias direcionadas (*targeted*) ou não direcionadas (*untargeted metabolomics*). A abordagem direcionada concentra-se na quantificação de metabólitos previamente conhecidos, geralmente associados a classes químicas, permitindo maior precisão e sensibilidade analítica. Em contraste, a metabolômica não direcionada busca capturar o maior número possível de metabólitos detectáveis exigindo posterior validação estrutural, sendo

particularmente útil para exploração da diversidade química, descoberta de novos compostos e identificação de padrões globais associados a fatores ontogenéticos ou ambientais (KATAM *et al.*, 2022). Essa distinção se torna fundamental, pois estratégias não direcionadas se mostram mais adequadas para descoberta e bioprospecção, enquanto abordagens direcionadas são preferenciais para validação e controle de qualidade.

Do ponto de vista aplicado, para a definição de parâmetros de controle de qualidade é importante considerar explicitamente a variabilidade ontogenética, incluindo a padronização de condições de coleta (estágio fenológico, horário, órgão vegetal), o estabelecimento de faixas aceitáveis para marcadores químicos e a validação de métodos analíticos quanto à precisão, exatidão e repetibilidade. A integração entre dados químicos, anatômicos e fenológicos permite construir modelos mais robustos de qualidade, reduzindo a variabilidade entre lotes e aumentando a reprodutibilidade farmacológica. Nesse cenário, a ontogenia química deixa de ser apenas um fator de variabilidade e passa a constituir eixo de racionalização tecnológica, orientado à seleção de material vegetal, à padronização de processos e à definição de estratégias mais eficientes de exploração sustentável e aproveitamento da biodiversidade.

Como discutido ao longo deste capítulo, o perfil químico das plantas sofre oscilações em resposta a diferentes estressores e condições ambientais, afetando diretamente o teor e o rendimento extrativo de metabólitos (PANT; PANDEY; DALL'ACQUA, 2021). Ao interpretar a diversidade química como um fenômeno dinâmico e temporal, a ontogenia química passa a ser também uma ferramenta de bioprospecção, orientada a identificar a janela ontogenética favorável ao objetivo farmacológico e produtivo. Em diversas espécies, por exemplo, alcaloides apresentam maiores concentrações em fases pré-floração (ABDULREDHA *et al.*, 2025). Dessa forma, diferenças químicas significativas podem ocorrer entre coletas mesmo em populações cultivadas sob condições semelhantes. A previsibilidade produtiva reforça a necessidade de protocolos de coleta baseados em monitoramento fenológico e análises químicas periódicas.

CONCLUSÃO

Ao longo deste capítulo, ficou evidente que o metabolismo especializado vegetal não pode ser interpretado como fixo ou imutável, uma vez que a expressão das vias biossintéticas varia ao longo do desenvolvimento, entre tecidos e em resposta ao ambiente, tornando o metaboloma um reflexo dinâmico da biologia da planta. Nesse contexto, a incorporação da ontogenia química às pesquisas em produtos naturais representa um avanço conceitual importante, ao permitir uma compreensão mais integrada dessa variabilidade.

Essa perspectiva possui implicações diretas na cadeia produtiva de insumos vegetais, especialmente no que se refere à padronização, rastreabilidade e bioprospecção racional. Ao considerar o estágio de desenvolvimento como fator determinante, torna-se possível estabelecer protocolos mais consistentes de coleta, padronização e controle de qualidade, além de orientar estratégias de cultivo voltadas ao melhor aproveitamento metabólico das espécies, transformando a variabilidade química de um obstáculo analítico em uma ferramenta de otimização produtiva.

Do ponto de vista científico, o avanço das ferramentas analíticas tem ampliado significativamente a capacidade de investigar essa complexidade, com abordagens metabolômicas integradas a dados transcriptômicos e redes moleculares, permitindo acompanhar a dinâmica das vias biossintéticas em diferentes tecidos e fases do desenvolvimento. Embora desafios ainda persistam, especialmente na aplicação de estratégias como análise de fluxo metabólico com marcação isotópica em sistemas vegetais complexos, essas abordagens representam um caminho promissor para aprofundar a compreensão da regulação metabólica. De forma geral, a integração entre ontogenia química, regulação metabólica e ferramentas analíticas modernas possibilita uma abordagem mais sistêmica e funcional dos produtos naturais, contribuindo tanto para o avanço do conhecimento científico quanto para o uso mais racional e eficiente da biodiversidade como fonte de compostos bioativos.

Nesse cenário, a consolidação da ontogenia química representa uma agenda promissora, com potencial para redirecionar estratégias de padronização, prospecção e uso sustentável de produtos naturais. Assim, o avanço das análises sob a perspectiva da ontogenia química tende a redefinir paradigmas na pesquisa e na produção de produtos naturais, deslocando o foco de uma visão estática para uma abordagem dinâmica, preditiva e orientada ao desenvolvimento.

REFERÊNCIAS

ABDULREDHA, H. A. *et al.* Growth-stage specific metabolic adaptations in *Capsicum annum*: Secondary metabolite dynamics and antioxidant plasticity. **Applied Chemical Engineering**, v. 8, n. 4, 2025. DOI: <https://doi.org/10.59429/ace.v8i4.5759>.

ADEEYO, A. O. *et al.* Metabolic profiling of plant and other natural products: Platforms, applications and quality evaluation. **Microchemical Journal**, v. 207, p. 111779, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.microc.2024.111779>.

AMBROSIO, L. L. *et al.* Capacidade adaptativa às secas visando segurança hídrica: uma revisão sistemática. **Revista Brasileira de Geografia Física**, Recife, v. 17, n. 6, p. 4554–4574, 2024. DOI: <https://doi.org/10.26848/rbvf.v17.n.6.p4554-4574>.

AZMIN, S. N. H. M. *et al.* A Review on recent advances on natural plant pigments in foods: Functions, extraction, importance and challenges. **Applied Biochemistry and Biotechnology**, v. 194, p. 4655-4672, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12010-022-04050-z>.

BARTON, K. E. The ontogenetic dimension of plant functional ecology. **Functional Ecology**, v. 38, n. 1, p. 98-113, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1111/1365-2435.14464>.

BOEGE, K; MARQUIS, R.J. Facing herbivory as you grow up: the ontogeny of resistance in plants. **Trends in Ecology & Evolution**, v. 20, n. 8, p. 441-448, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tree.2005.05.001>.

BOSE, T. *et al.* Tissue ontogeny and chemical composition influence bacterial biodiversity in the wood and shoot tip of *Populus nigra*. **Plant Biology**, v. 27, n. 5, p. 913-923, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1111/plb.13724>.

BUCHANAN, B. B. *et al.* **Biochemistry and molecular biology of plants**, 2. ed. Chichester: Wiley, 2015.

CARVALHO, I. S. *et al.* Effect of photoperiod on flavonoid pathway activity in sweet potato (*Ipomoea batatas* (L.) Lam.) leaves. **Food Chemistry**, v. 118, n. 2, p. 384-390, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2009.05.005>.

CIRAK, C. *et al.* Ontogenetic changes in phenolic contents and volatile composition of *Hypericum androsaemum* and *Hypericum xylosteifolium*. **Biochemical Systematics and Ecology**, v. 102, p. 104429, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bse.2022.104429>.

CHAPIN, F. S.; MATSON, P. A.; MOONEY, H. A. **Principles of terrestrial ecosystem ecology**. 2 ed. New York: Springer, 2002.

COLEY, P. D. Herbivory and defensive characteristics of tree species in a lowland tropical forest. **Ecological Monographs**, Washington, v. 53, n. 2, p. 209-233, 1983. DOI: <https://doi.org/10.2307/1942495>.

COLEY, P. D.; BARONE, J. A. Herbivory and plant defenses in tropical forests. **Annual Review of Ecology and Systematics**, Palo Alto, v. 27, p. 305-335, 1996. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev.ecolsys.27.1.305>.

CUNHA, T. L. O. *et al.* Effect of water deficit on secondary metabolites and nutrient content on forage sorghum. **Agronomy**, v. 14, n. 9, p. 2046, 2024. DOI: <https://doi.org/10.3390/agronomy14092046>.

DAYRELL, R. L. C. *et al.* Ontogenetic shifts in plant ecological strategies. **Functional Ecology**, v. 32, n. 12, p. 2730-2741, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1111/1365-2435.13221>.

DE BRITO-MACHADO, D. *et al.* Volatile chemical variation of essential oils and their correlation with insects, phenology, ontogeny and microclimate: *Piper mollicomum* Kunth, a case of study. **Plants**, v. 11, n. 24, p. 3535, 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/plants11243535>.

DIXON, R. A.; DICKINSON, A. J. A century of studying plant secondary metabolism—From “what?” to “where, how, and why?”. **Plant Physiology**, v. 195, n. 1, p. 48-66, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1093/plphys/kiad596>.

DOS SANTOS, E. L. *et al.* Seasonal and circadian rhythm of a 1, 8-cineole chemotype essential oil of *Calycolpus goetheanus* from marajó island, Brazilian amazon. **Natural Product Communications**, v. 15, n. 6, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1177/1934578X20933055>.

EHRlich, P. R.; RAVEN, P. H. Butterflies and plants: A study in coevolution. **Evolution**, Oxford, v. 18, n. 4, p. 586–608, 1964. DOI: <https://doi.org/10.2307/2406212>.

ERB, M.; KLIEBENSTEIN, D. J. Plant secondary metabolites as defenses, regulators, and primary metabolites: The blurred functional trichotomy. **Plant physiology**, Berna, v. 184, p. 39–52, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1104/pp.20.00433>.

FELISBERTO, J. S.; RAMOS, Y. J.; MOREIRA, D. Flutuação fenotípica química na ontogenia da planta medicinal *Piper rivinoides* Kunth: Uma estratégia de modulação da defesa química?. **Anais do Simpósio de Plantas Medicinais do Brasil**, 2023. Disponível em: <https://resumos.sbpmmed.org.br/index.php/spmb/article/view/247>. Acesso em: 19 fev. 2026.

FELISBERTO, J. S. *et al.* Spatio-temporal variations of volatile metabolites as an eco-physiological response of a native species in the tropical forest. **Plants**, v. 13, n. 18, p. 2599, 2024. DOI: <https://doi.org/10.3390/plants13182599>.

FERREIRA, M. M. C. **Quimiometria conceitos, métodos e aplicações**. Campinas: UNICAMP, 2015.

GARGI, B. *et al.* Impact of circadian rhythm and seasonal variability on the essential oil of *Allium stracheyi* Baker from Uttarakhand, Himalaya. **Food Chemistry: X**, v. 29, p. 102720, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2025.102720>.

GHASEMI, S. *et al.* Drought stress-mediated alterations in secondary metabolites and biosynthetic gene expression in cumin plants: Insights from gene-specific and metabolite-level analyses. **Plant stress**, v. 10, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.stress.2023.100241>.

GOBBO-NETO, L.; LOPES, N. P. Plantas medicinais: fatores de influência no conteúdo de metabólitos secundários. **Química Nova**, 30(2): 374–381, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0100-40422007000200026>.

HARBORNE, J. B. **Introduction to Ecological Biochemistry**. 4. ed. Londres: Academic Press, 1993.

HÉRAULT, B. *et al.* Functional traits shape onto genetic growth trajectories of rain forest tree species. **Journal of Ecology**, v. 99, n. 6, p. 1431–1440, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1365-2745.2011.01883x>.

HERMS, D. A.; MATTSON, W. J. The dilemma of plants: To grow or defend. **The Quarterly Review of Biology**, v. 67, n. 3, p. 283–335, 1992. DOI: <https://doi.org/10.1086/417659>.

HUANG, X.-Q.; DUDAREVA, N. Plant specialized metabolism. **Current biology**, v. 33, n. 11, p. 473–478, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cub.2023.01.057>.

JAMLOKI, A. *et al.* Elucidating the relevance of high temperature and elevated CO₂ in plant secondary metabolites (PSMs) production. **Heliyon**, v. 7, n. 8, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e07709>.

KATAM, R. *et al.* Advances in plant metabolomics and its applications in stress and single-cell biology. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 23, n. 13, p. 6985, 2022. DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms23136985>.

KESSLER, A.; KALSKE, A. Plant secondary metabolite diversity and species interactions. **Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics**, v. 49, n. 1, p. 115–138, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-ecolsys-110617-062406>.

KIM, C. *et al.* High Ambient temperature accelerates leaf senescence via phytochrome-interacting factor 4 and 5 in *Arabidopsis*. **Molecules and Cells**, Cell, v. 43, n. 7, p. 645–661, 2020. DOI: <https://doi.org/10.14348/molcells.2020.0117>.

KONG, C.-H. *et al.* Allelochemicals and signaling chemicals in plants. **Molecules**, v. 24, n. 15, 2019. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules24152737>.

KUHLISCH, C.; POHNERT, G. Metabolomics in chemical ecology. **Natural product reports**, v. 32, n. 7, p. 937–955, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1039/C5NP00003C>.

KUROKAWA, H. *et al.* Plant characteristics drive ontogenetic changes in herbivory damage in a temperate forest. **Journal of Ecology**, v. 110, n. 11, p. 2772-2784, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1111/1365-2745.13990>.

LAWRENCE-PAUL, E. H.; LASKY, J. R. Ontogenetic changes in ecophysiology are an understudied yet important component of plant adaptation. **American journal of botany**, v. 111, n. 3, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1002/ajb2.16294>.

LI, Y. *et al.* Intensity-dependent mass search for improving metabolite database matches in chemical isotope labeling LC-QTOF-MS-based metabolomics. **Analytica Chimica Acta**, v. 1272, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2023.341467>.

LUNAU, K.; CAMARGO, M. G. G.; REN, Z. -X. Bees, flowers and UV. **Plant Biology**, v. 27, n. 6, p. 948-961, 2025. DOI: <https://doi.org/10.1111/plb.70050>.

MANICKAM, S. *et al.* Plant metabolomics: current initiatives and future prospects. **Current issues in molecular biology**, v. 45, n. 11, p. 8894-8906, 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/cimb45110558>.

MANSOUR, M. M. F. Anthocyanins: Biotechnological targets for enhancing crop tolerance to salinity stress. **Scientia Horticulturae**, v. 319, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2023.112182>.

MARTI, G. *et al.* Metabolomics reveals herbivore-induced metabolites of resistance and susceptibility in maize leaves and roots. **Plant, Cell & Environment**, v. 36, n. 3, p. 621-639, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1111/pce.12002>.

MCLAFFERTY, F. W.; TUREČEK, F. **Interpretation of mass spectra**. Mill Valley, Calif.: University Science Books, 1993.

MÜLLER, C.; JUNKER, R. R. Chemical phenotype as an important and dynamic niche dimension of plants. **New Phytologist**, v. 234, n. 4, p. 1168-1174, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1111/nph.18075>.

NICOLESCU, T. O. Interpretation of mass spectra. **Mass Spectrometry**, Intech Open, 2017. DOI: <https://doi.org/10.5772/intechopen.68595>.

OSAKABE, Y. *et al.* Response of plants to water stress. **Frontiers in Plant Science**, Lausanne, v. 5, n. 86, 2014. DOI: <https://doi.org/10.3389/fpls.2014.00086>.

PANT, P.; PANDEY, S.; DALL'ACQUA, S. The influence of environmental conditions on secondary metabolites in medicinal plants: A literature review. **Chemistry & Biodiversity**, v. 18, n. 11, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1002/cbdv.202100345>.

PEREIRA, E. J. P. *et al.* Circadian rhythm, and antimicrobial and anticholinesterase activities of essential oils from *Vitex gardneriana*. **Natural Product Communications**, v. 13, n. 5, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1177/1934578X1801300528>.

PINTO, R. C. Chemometrics methods and strategies in metabolomics. **Advances in experimental medicine and biology**, v. 965, p. 163–190, 2017. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-319-47656-8_7.

QUINTERO, C.; BOWERS, M. D. Changes in plant chemical defenses and nutritional quality as a function of ontogeny in *Plantago lanceolata* (Plantaginaceae). **Oecologia**, v. 168, n. 2, p. 471–481, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00442-011-2114-x>.

RADÁCSI, P. *et al.* Effect of irrigation on the production and volatile compounds of sweet basil cultivars (*Ocimum basilicum* L.). **Herba Polonica**, Varsóvia, v. 66, n. 4, p. 14–24, 2020. DOI: <https://doi.org/10.2478/hepo-2020-0021>.

RAGUSO, R. A. Wake up and smell the roses: The ecology and evolution of floral scent. **Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics**, v. 39, n. 1, p. 549–569, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev.ecolsys.38.091206.095601>.

RAMANI, S.; JAYABASKARAN, C. Enhanced catharanthine and vindoline production in suspension cultures of *Catharanthus roseus* by ultraviolet-B light. **Journal of Molecular Signaling**, v. 3, p. 9, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1186/1750-2187-3-9>.

RAMOS, Y. J. *et al.* Advanced chemophenetic analysis of essential oil from leaves of *Piper gaudichaudianum* Kunth (Piperaceae) using a new reduction-oxidation index to explore seasonal and circadian rhythms. **Plants**, v. 10, n. 10, 2021. DOI: <https://doi.org/10.3390/plants10102116>.

RAMOS, Y. J. *et al.* Chemophenetic and chemodiversity approaches: New insights on modern study of plant secondary metabolite diversity at different spatiotemporal and organizational scales. **Revista Brasileira de Farmacognosia**, v. 33, p. 49–72, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1007/s43450-022-00327-w>.

RAVEN, P. H.; EVERT, R. F.; EICHHORN, S. E. **Biologia vegetal**. 8. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 2014.

SALAM, U. *et al.* Plant metabolomics: an overview of the role of primary and secondary metabolites against different environmental stress factors. **Life**, v. 13, n. 3, p. 706, 2023. DOI: <https://doi.org/10.3390/life13030706>.

SILVA, F. A. *et al.* Metabolomic Profiling of *Nicotiana Spp.* Nectars indicate that pollinator feeding preference is a stronger determinant than plant phylogenetics in shaping nectar diversity. **Metabolites**, v. 10, n. 5, p. 214, 2020. DOI: <https://doi.org/10.3390/metabo10050214>.

TAIZ, L. *et al.* **Plant Physiology and Development**. 7. ed. New York: Sinauer Associates; Oxford University Press, 2023.

VAN DAM, N. M.; VAN DER MEIJDEN, E. A role for metabolomics in plant ecology. **Annual Plant Reviews Volume 43: Biology of Plant Metabolomics**, v. 43, p. 87-107, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1002/9781444339956.ch4>.

XIAO, J. F.; ZHOU, B.; RESSOM, H. W. Metabolite identification and quantitation in LC-MS/MS-based metabolomics. **Trends in Analytical Chemistry**, v. 32, p. 1–14, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2011.08.009>.

WANG, X. *et al.* Tissue-specific transcriptome analyses reveal candidate genes for stilbene, flavonoid and anthraquinone biosynthesis in the medicinal plant *Polygonum cuspidatum*. **BMC Genomics**, v. 22, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1186/s12864-021-07658-3>.

WANG, M. *et al.* Unraveling the specialized metabolic pathways in medicinal plant genomes: a review. **Frontiers in Plant Science**, v. 15, 2024. DOI: <https://doi.org/10.3389/fpls.2024.1459533>.

WINK, M. **Functions and biotechnology of plant secondary metabolites**. 1. ed. Chichester: Wiley-Blackwell, 2010.