



MARIA JOÃO RAMOS

ENZIMOLOGIA COMPUTACIONAL

Esta palestra trata dos cálculos com que nos deparamos para chegar a resultados no âmbito da enzimologia computacional, em geral, e nos processos biocatalíticos, em particular.

Serão apresentados cálculos concebidos para estudar interações proteicas e contornar problemas em alguns sistemas enzimáticos sistemas enzimáticos relevantes, bem como desenvolvimentos recentes no estabelecimento de alguns mecanismos catalíticos. Recorremos a diferentes metodologias e estudos diferentes para analisar a energética dos processos relacionados com os sistemas em estudo e avaliar a sua viabilidade de acordo com os dados experimentais disponíveis [1-6]

Referências: [1] SF Sousa, AJM Ribeiro, RPP Neves, NF Brás, PA. Fernandes, MJ. Ramos, WIREs, 2017, 7, 1. [2] RPP. Neves, PA. Fernandes, MJ. Ramos, PNAS, 2017, 114, E4724. [3] P Ferreira, NMFSA Cerqueira, PA Fernandes, MJ Romão, MJ Ramos, ACS Catalysis, 2020, 10, 16, 9276. [4] AV Pinto, P Ferreira, RPP Neves, PA Fernandes, MJ Ramos, ACS Catalysis, 2021, 11, 16, 10416. [5] S Das, U Raucci, RPP Neves, MJ Ramos, M Parrinello, ACS Catalysis, 2023, 13, 12, 8092. [6] S Das, U Raucci, RPP Neves, MJ Ramos, M Parrinello, Correlacionando a reatividade enzimática para diferentes substratos usando variáveis coletivas transferíveis orientadas por dados. PNAS, 2024, 121(49):e2416621121.



COMPUTATIONAL ENZYMOLOGY

This talk is concerned with the calculations that we come across to figure out results within computational enzymology, in general, and biocatalytic processes, in particular. Calculations devised to study protein interactions and circumvent problems in some relevant enzymatic systems will be reported as well as recent developments in the establishment of some catalytic mechanisms. We have resorted to different methodologies and altogether different studies to analyze the energetics of processes related to the systems under study and evaluate their feasibility according to the available experimental data. [1-6]

References: [1] SF Sousa, AJM Ribeiro, RPP Neves, NF Brás, PA. Fernandes, MJ. Ramos, WIREs, 2017, 7, 1. [2] RPP. Neves, PA. Fernandes, MJ. Ramos, PNAS, 2017, 114, E4724. [3] P Ferreira, NMFSa Cerqueira, PA Fernandes, MJ Romão, MJ Ramos, ACS Catalysis, 2020, 10, 16, 9276. [4] AV Pinto, P Ferreira, RPP Neves, PA Fernandes, MJ Ramos, ACS Catalysis, 2021, 11, 16, 10416. [5] S Das, U Raucci, RPP Neves, MJ Ramos, M Parrinello, ACS Catalysis, 2023, 13, 12, 8092. [6] S Das, U Raucci, RPP Neves, MJ Ramos, M Parrinello, Correlating enzymatic reactivity for different substrates using transferable data-driven collective variables. PNAS, 2024, 121(49):e2416621121.

Academia das Ciências de Lisboa, 15 de abril de 2025