ACADEMIA DAS CIÊNCIAS
LISBOA

MARIA JOÃO RAMOS

ENZYMOLOGIA COMPUTACIONAL

S

LAQV@REQUIMTE, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto

Esta comunicação centra-se em resultados obtidos no âmbito da enzimologia computacional, em geral, e de processos biocatalíticos, em particular.Serão apresentados resultados de estudos de interações em alguns sistemas enzimáticos relevantes, bem como avanços recentes no esclarecimento de determinados mecanismos catalíticos. Recorremos a diferentes metodologias e a abordagens de natureza distinta para analisar a energética dos processos associados aos sistemas em estudo e avaliar a sua viabilidade à luz dos dados experimentais disponíveis. [1-6]

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]

Referênciass:

[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, 10 de dezembro de 2026