

Estudio Conformacional, utilizando un Potencial Atomo-Atomo Empírico, de Análogos de Taurina

ANA M. RODRIGUEZ, GLADYS M. CIUFFO,
MARIO R. ESTRADA y ESTEBAN A. JAUREGUI

*Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia,
Cátedra de Química General, Chacabuco y Pedernera, 5700 San Luis, Argentina*

RESUMEN. Taurina es un β -aminoácido reconocido como neuromodulador. Se realizó un estudio conformacional sobre una serie de análogos estructuralmente relacionados a taurina: L-cisteinsulfínico, homotaurina, β -alanina, L-alanina y L-cisteína. Todos ellos se estudiaron en la forma zwitter-iónica, por ser la especie preponderante a pH fisiológico. Para realizar el análisis conformacional se empleó un potencial átomo-átomo empírico. En todos los casos estudiados se obtiene un equilibrio conformacional entre las diferentes conformaciones accesibles, sin encontrar un rotámero predominante. Se hace una discusión comparativa de las semejanzas y diferencias conformacionales y estructurales entre los compuestos estudiados, en función de su diferente actividad biológica. Se considera fundamental para la actividad la presencia de un grupo aniónico en posición β . Los compuestos activos presentan una importante población en conformaciones con una distancia del orden de los 3 Å entre el grupo amino y el grupo aniónico en posición β . Por otra parte, estos compuestos presentan una gran flexibilidad, que les permitiría adaptarse a los requerimientos del receptor.

SUMMARY. "Conformational Study of Taurine Analogues Using an Empirical Atom-Atom Potential". At the present time taurine (a β -aminoacid) is accepted as a neuromodulator. In this paper a conformational analysis of a series of taurine analogues have been performed: L-cysteinesulfinic acid, homotaurine, β -alanine, L-alanine and L-cysteine. Compounds were studied in the zwitter-ionic form, that prevails at physiological conditions. For conformational analysis an atom-atom potential calculation was used. A conformational equilibrium among different conformations was found for the different molecules studied. A comparative discussion on conformational and structural similarities and differences among the compounds studied, according to their different biological activities, has been made. The anionic group in β -position was considered of great importance for activity. An important conformational population with a common distance of about 3 Å between amino and β -anionic groups was found for all the active compounds. On the other hand these compounds show a great flexibility that allow them to fit structural requeriments of the receptor site.

PALABRAS CLAVE: Análogos de taurina; Análisis conformacional; Requerimientos estructurales.
KEY WORDS: *Taurine analogues. Conformational analysis. Structural requeriments.*