

## A New Dinuclear La(III) Complex: Activity Evaluation on Colitis by Protecting the Colonic Epithelial Cells

Xiurong ZHAO

Department of General Surgery, Fudan University,  
Shanghai 200040, China

**SUMMARY.** In the present study, a new La(III)-based complex with the molecular form of  $[La_2(L)_2(dbm)_2(H_2O)_2] \cdot nCH_3OH$  (1, Hdbm = 1,3-diphenyl-1,3-propanedione and  $H_2L = 2-[(1E)-\{(pyridin-2-yl)formamido\}imino]methylbenzoic acid$ ) has been successfully synthesized using a polydentate Schiff base ligand ( $H_2L$ ) and reacting it with the  $\beta$ -diketone salts  $La(dbm)_3 \cdot 2H_2O$ . Its treatment activity on the colitis was evaluated and the related mechanism was explored as well. Firstly, the ELISA assay was conducted and the content of the inflammatory cytokines released into the plasma was measured. Then, the activation of the NF-KB signaling pathway was measured with real time RT-PCR. Molecular docking simulation suggests that only the carboxyl groups on the La complex are able to form hydrogen bonding interactions with the active sites, however, there is no binding interactions formed by carbonyl, amide and pyridine groups since those groups are saturated by the binding interactions with the La ion.

**RESUMEN.** En el presente estudio, se desarrolló un nuevo complejo a base de La(III) con la forma molecular de  $[La_2(L)_2(dbm)_2(H_2O)_2] \cdot nCH_3OH$  (1, Hdbm = 1,3-difenil-1,3-propanodiona y  $H_2L = \text{ácido } 2-[(1E)-\{(piridin-2-il)formamido\}imino]metilbenzoico$ ) se ha sintetizado con éxito utilizando un ligando de base de Schiff polidentado ( $H_2L$ ) y haciéndolo reaccionar con el  $\beta$ - sales de dicetona  $La(dbm)_3 \cdot 2H_2O$ . Se evaluó su actividad terapéutica sobre la colitis y también se exploró el mecanismo relacionado. En primer lugar, se realizó el ensayo ELISA y se midió el contenido de citocinas inflamatorias liberadas en el plasma. Luego, se midió la activación de la vía de señalización NF-KB con RT-PCR en tiempo real. La simulación de acoplamiento molecular sugiere que solo los grupos carboxilo en el complejo La son capaces de formar interacciones de enlace de hidrógeno con los sitios activos; sin embargo, no hay interacciones de unión formadas por los grupos carbonilo, amida y piridina, ya que esos grupos están saturados por las interacciones de unión con el ion La.

**KEY WORDS:** Coordination complex, colonic epithelial cells, molecular docking

\* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: xiurong\_zhao22@126.com