

Lanthanide Coordination Complex: Crystal Structure and Presentation Activity on Inflammation After Abortion

Mei ZHANG¹ & Wei-Xia ZHANG^{2*}

¹ Department of Obstetrics, ² Department of Gynecology,
The Second Affiliated Hospital of Xi'an Medical University,
Xi'an, Shaanxi, China

SUMMARY. In this study, a new lanthanide coordination complex $[\text{GdL}(\text{PhCOO})(\text{CH}_3\text{OH})](\text{ClO}_4)_2 \cdot (\text{CH}_3\text{OH})_2$ (**1**), in which L denotes the deprotonated macrocyclic ligand, were synthesized via condensation of 2,6-diformyl-4-methyl-phenol and 1,3-diamino-2-propanol by employing benzoate as the second ligand. Its application values on the inflammation after abortion was determined. The ELISA detection kit was used to measure the levels of inflammatory cytokines released after abortion under indicated treatment. Besides, the activation levels of the AMPK signaling pathway in the endometrial cells was also detected by real time RT-PCR after indicated compound incubation. Although all the polar atoms on the ligands of the Gd ion complex are facing to the metal ion center, however, molecular docking simulation found that those polar atoms still exhibited potentials for binding interactions.

RESUMEN. En este estudio, un nuevo complejo de coordinación de lantánidos $[\text{GdL}(\text{PhCOO})(\text{CH}_3\text{OH})](\text{ClO}_4)_2 \cdot (\text{CH}_3\text{OH})_2$ (**1**), en el que L indica el ligando macrocíclico desprotonado, se sintetizó mediante la condensación de 2,6-diformil-4-metil-fenol y 1,3-diamino-2-propanol empleando benzoato como segundo ligando. Se determinaron sus valores de aplicación sobre la inflamación postaborto. El kit de detección de ELISA se utilizó para medir los niveles de citocinas inflamatorias liberadas después de un aborto bajo el tratamiento indicado. Además, los niveles de activación de la vía de señalización de AMPK en las células endometriales también se detectaron mediante RT-PCR en tiempo real después de la incubación indicada del compuesto. Aunque todos los átomos polares de los ligandos del complejo iónico Gd están orientados hacia el centro del ión metálico, sin embargo, la simulación de acoplamiento molecular encontró que esos átomos polares todavía exhibían potenciales para interacciones de unión.

KEY WORDS: coordination complex, crystal structure, macrocyclic Schiff base, molecular docking.

* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* xyefyzwx999@163.com