

## Application Values of a New Lanthanide Coordination Complex on Smoking Cessation by Regulating the Dopamine Content in the Brain

Ting ZHANG #, Jing REN # & Ting-Jian LI \*

Department of Pulmonary and Critical Care Medicine, The First People's Hospital of Wenling,  
Wenling, Zhejiang, China

**SUMMARY.** In the present work, a novel lanthanide coordination complex (CP) that is,  $[\text{Sm}(\text{L})_3 \cdot \text{CH}_3\text{OH}]$  (**1**, HL is N-(pyridin-2-ylcarbamothioyl)benzamide), was produced in success and next characterized through single-crystal X-ray diffraction, IR, EA. With an aim of cultivating novel candidates for treating the smoking cessation, this CP's bio-activity was discussed and the specific mechanism was also investigated. The dopamine level that released into brain was examined through the detection of ELISA. The analysis of real time RT-PCR was conducted for measuring the dopamine receptor relative expression. The simulation of molecular docking proved that only imide groups on Sm complex have the ability to interact with the probe receptor through the hydrogen bonding, the formed hydrogen bond has strong interaction based on the binding distance and therefore exhibited excellent biological activity.

**RESUMEN.** En el presente trabajo se produjo con éxito un nuevo complejo de coordinación de lantánidos (CP), es decir,  $[\text{Sm}(\text{L})_3 \cdot \text{CH}_3\text{OH}]$  (**1**, HL es N-(piridin-2-ilcarbamotioil)benzamida), y luego se caracterizó mediante difracción de rayos X monocristalino, IR, EA. Con el objetivo de cultivar nuevos candidatos para el tratamiento de la cesación tabáquica, se discutió la bioactividad de esta CP y también se investigó el mecanismo específico. El nivel de dopamina que se liberó en el cerebro se examinó mediante la detección de ELISA. Se realizó el análisis de RT-PCR en tiempo real para medir la expresión relativa del receptor de dopamina. La simulación del acoplamiento molecular demostró que solo los grupos imida en el complejo Sm tienen la capacidad de interactuar con el receptor de la sonda a través del enlace de hidrógeno, el enlace de hidrógeno formado tiene una fuerte interacción basada en la distancia de unión y, por lo tanto, exhibió una excelente actividad biológica.

**KEY WORDS:** Coordination polymer, molecular docking, smoking cessation,

\* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: lilin407050116@126.com

# Authors who contributed equally to this work.