



## A New Zn(II)-Based Coordination Complex: Crystal Structure and Biological Activity on Child Bronchopneumonia

Ping-Ding LIU<sup>1</sup> & Li-Jia NING<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> Department of Paediatrics, Weinan Maternal and Child Health Hospital,  
Weinan, Shaanxi, China

<sup>2</sup> Department of Paediatrics, Yangling Demonstration Zone Hospital,  
Xianyang, Shaanxi, China

**SUMMARY.** In the present study, a new Zn(II)-based coordination complex with the chemical formula of  $[Zn_2(2-HBA)_2(bimb)_4]$  (**1**) has been successfully prepared by reaction of  $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$  with the mixed ligands of 2-hydroxybenzoic acid (2-HBA) and 1,2-bis[(1*H*-imidazole-1-yl)methyl]benzene (bimb) under hydrothermal conditions. Its application values on the children bronchopneumonia were evaluated and the related mechanism was discussed at the same time. The real time RT-PCR was conducted to determine the activation levels of the AMPK signaling pathway. In addition to this, the levels of the inflammatory cytokines (IL-1 $\beta$  and TNF- $\alpha$ ) released into the alveolar lavage fluid was measured with enzyme linked immunosorbent assay (ELISA) detection kit. Simulation results obtained from molecular docking simulation indicated that only the oxygen atom on carboxyl group exhibited good activities to the active sites on the protein, which could be used to rationalize the biological capability of the complex.

**RESUMEN.** En el presente estudio, se preparó con éxito un nuevo complejo de coordinación basado en Zn (II) con la fórmula química de  $[Zn_2(2-HBA)_2(bimb)_4]$  (**1**) mediante la reacción de  $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$  con los ligandos mixtos de ácido 2-hidroxibenzoico (2-HBA) y 1,2-bis [(1*H*-imidazol-1-il) metil] benceno (bimb) en condiciones hidrotermales. Se evaluaron sus valores de aplicación en la bronconeumonía infantil y al mismo tiempo se discutió el mecanismo relacionado. La RT-PCR en tiempo real se realizó para determinar los niveles de activación de la vía de señalización de AMPK. Además de esto, se midieron los niveles de las citocinas inflamatorias (IL-1 $\beta$  y TNF- $\alpha$ ) liberadas en el líquido de lavado alveolar con un kit de detección de ensayo inmunoabsorbente ligado a enzimas (ELISA). Los resultados de la simulación obtenidos de la simulación de acoplamiento molecular indicaron que solo el átomo de oxígeno en el grupo carboxilo exhibió buenas actividades en los sitios activos de la proteína, lo que podría usarse para racionalizar la capacidad biológica del complejo.

**KEY WORDS:** child bronchopneumonia, coordination complex, hydrothermal reaction, molecular docking, Zn center.

\* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* ninglijia6@163.com