



Important Application Value of a New Gd(III) Coordination Polymer in Treatment of Sepsis by Inhibiting the Occurrence of Inflammatory Storm

Ji PENG

Critical Care Unit, Ankang Central Hospital,
Ankang, Shaanxi, China

SUMMARY. Through reaction between N-(pyridin-2-ylcarbamothioyl)benzamide (HL), the thiourea Schiff-base ligand and $Gd(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$, a fresh coordination polymer (CP) based on Gd(III), that is, $[Gd(L)_3 \cdot CH_3OH]$, has been triumphantly created under the situation of hydrothermal reaction and it was characterized through single-crystal X-ray diffraction, EA, together with IR. The above CP's important application value in the treatment of sepsis was evaluated. As have expected, the simulation of molecular docking unveiled that the amide group against the Gd complex was anticipated into the binding interaction with the target protein through the hydrogen bonding interaction.

RESUMEN. A través de la reacción entre N-(piridin-2-ilcarbamotioil)benzamida (HL), el ligando de base de Schiff de tiourea y $Gd(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$, un nuevo polímero de coordinación (CP) basado en Gd(III), es decir, $[Gd(L)_3 \cdot CH_3OH]$, ha sido creado triunfalmente en la situación de reacción hidrotermal y se caracterizó mediante difracción de rayos X monocristalinos, EA, junto con IR. Se evaluó el importante valor de aplicación del CP anterior en el tratamiento de la sepsis. Como se esperaba, la simulación del acoplamiento molecular reveló que el grupo amida contra el complejo de Gd se anticipaba en la interacción de unión con la proteína objetivo a través de la interacción del enlace de hidrógeno.

KEY WORDS: coordination polymer, molecular docking, sepsis,

* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* peng_ji11@126.com