



A New Binuclear Co(II)-based Coordination Complex: Crystal Structure and Inhibitory Activity on Peritonitis

Qin CHEN #, Jin-Hua ZHAO # & Lei SONG *

Department of Pediatrics, Nantong First People's Hospital,
Nantong, Jiangsu, China

SUMMARY. In the present study, a new Co(II)-based coordination complex with the chemical formula of $\text{Co}_2(\text{PT})_4(\text{H}_2\text{O})_3$ (**1**) has been successfully prepared by reaction of $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ with the ligand of 3-(pyridin-2-yl)-1,2,4-triazole (HPT) under hydrothermal conditions in the mixed solution (the volume ratio of methanol and water is 1:4). For the treatment of peritonitis with acute pancreatitis in children, its application values were evaluated with serial biological experiments. Firstly, the bacterial colony numbers of the *Escherichia coli* after indicated treatment was determined with colony forming unit (CFU) assay. Then, the relative expression of the *Escherichia coli* survival genes was also measured with real time RT-PCR. Although there are plenty of nitrogen atoms on the ligands of the Co complex, however, only few were observed through molecular docking simulation to form binding interactions with the protein.

RESUMEN. En el presente estudio, se ha preparado con éxito un nuevo complejo de coordinación basado en Co(II) con la fórmula química de $\text{Co}_2(\text{PT})_4(\text{H}_2\text{O})_3$ (**1**) mediante la reacción de $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ con el ligando de 3-(piridin-2-il)-1,2,4-triazol (HPT) en condiciones hidrotermales en la solución mixta (la relación en volumen de metanol y agua es 1: 4). Para el tratamiento de la peritonitis con pancreatitis aguda en niños, sus valores de aplicación se evaluaron con experimentos biológicos seriados. En primer lugar, se determinó el número de colonias bacterianas de *Escherichia coli* después del tratamiento indicado con un ensayo de unidad formadora de colonias (UFC). Luego, también se midió la expresión relativa de los genes de supervivencia de *Escherichia coli* con RT-PCR en tiempo real. Aunque hay muchos átomos de nitrógeno en los ligandos del complejo Co, sin embargo, solo se observaron unos pocos a través de la simulación de acoplamiento molecular para formar interacciones de unión con la proteína.

KEY WORDS: Co center, coordination complex, hydrothermal reaction, molecular docking.

* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: chenqin2002@163.com
These authors contributed equally to this work.