

## 基于网络药理学与分子对接技术研究制痲酊治疗Ⅱ度烧伤的作用机制

张强, 李静, 刘越, 储晓琴

### The mechanism of Medicoscab tincture in the treatment of second-degree burns based on network pharmacology and molecular docking technology

ZHANG Qiang, LI Jing, LIU Yue, CHU Xiaoqin

在线阅读 View online: <http://yxsj.smmu.edu.cn/cn/article/doi/10.12206/j.issn.2097-2024.202307014>

#### 您可能感兴趣的其他文章

##### Articles you may be interested in

#### 基于网络药理学和分子对接技术探究定清片活性成分治疗白血病的作用机制

Mechanism of effective ingredients of Dingqing tablets in the treatment of leukemia based on network pharmacology and molecular docking technology

药学实践与服务. 2024, 42(11): 479-486 DOI: [10.12206/j.issn.2097-2024.202401073](https://doi.org/10.12206/j.issn.2097-2024.202401073)

#### 基于网络药理学和分子对接技术研究金芪清疏颗粒治疗社区获得性肺炎的潜在机制

Study on the potential mechanism of JQSG for the treatment of CAP based on network pharmacology and molecular docking technology

药学实践与服务. 2024, 42(11): 471-478 DOI: [10.12206/j.issn.2097-2024.202312014](https://doi.org/10.12206/j.issn.2097-2024.202312014)

#### 基于网络药理学与分子对接预测鸡骨草特征图谱研究

Prediction of characteristic chromatogram for Abri Herba based on network pharmacology and molecular docking

药学实践与服务. 2024, 42(8): 350-358 DOI: [10.12206/j.issn.2097-2024.202303048](https://doi.org/10.12206/j.issn.2097-2024.202303048)

#### 巴戟天丸组方对A $\beta$ 损伤成骨细胞的作用及基于网络药理学的机制研究

The roles of Bajitianwan formula on A $\beta$ -injured osteoblasts and the mechanism based on network pharmacology

药学实践与服务. 2024, 42(7): 285-290, 296 DOI: [10.12206/j.issn.2097-2024.202305011](https://doi.org/10.12206/j.issn.2097-2024.202305011)

#### 基于UHPLC-Q/TOF-MS代谢组学策略的葛根-知母药对防治阿尔茨海默病的药效与作用机制研究

Study on the pharmacological effects and mechanism of Gegen-Zhimu herb pair in preventing and treating Alzheimer's disease by UHPLC-Q/TOF-MS metabolomics strategy

药学实践与服务. 2025, 43(1): 30-40 DOI: [10.12206/j.issn.2097-2024.202409035](https://doi.org/10.12206/j.issn.2097-2024.202409035)



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

· 论著 ·

## 基于网络药理学与分子对接技术研究制痂酊治疗Ⅱ度烧伤的作用机制

张 强<sup>1</sup>, 李 静<sup>2</sup>, 刘 越<sup>2</sup>, 储晓琴<sup>2</sup> (1. 南京鼓楼医院集团安庆市石化医院药学部, 安徽 安庆 246002; 2. 安徽中医药大学药学院, 安徽 合肥 230012)

**【摘要】目的** 运用网络药理学和分子对接技术探讨制痂酊治疗Ⅱ度烧伤的作用机制。**方法** 从中药系统药理学数据库与分析平台(TCMSP)、GeneCards 数据库和 OMIM 数据库筛选制痂酊的有效成分及烧伤的相关靶点; 通过 Cytoscape 软件绘制相关靶点图以及疾病网络; 用 Metascape 平台进行潜在靶点进行基因功能(GO)富集分析和基因百科全书(KEGG)通路分析; 用 AutoDockTools 进行分子对接。**结果** 筛出有效成分 19 个, 靶点交集 179 个。主要涉及无机物质反应、细胞对氮化合物反应以及对外来异种刺激的反应, 膜筏、囊泡腔和内质网腔等生物学过程。包括 AGE-RAGE、PI3K-Akt、IL-17 及 TNF 信号通路等。核心靶点为 AKT1、TNF、IL-6、甘油醛-3-磷酸脱氢酶(GAPDH)、TP53 等。制痂酊活性成分与多个靶点对接, 其中  $\beta$ -谷甾醇与 AKT1、GAPDH、TP53 有强烈的结合活性。**结论** 制痂酊中槲皮素、山柰酚、汉黄芩素、 $\beta$ -谷甾醇等核心活性成分可能通过作用于 AKT1、GAPDH、TP53、IL-6 等靶点, 调控 AGE-RAGE、PI3K-Akt、IL-17、TNF 等信号通路, 辅助缓解烧伤。本研究为明确制痂酊治疗烧伤类疾病作用机制奠定了理论基础。

**【关键词】** 制痂酊; 烧伤; 网络药理学; 分子对接技术

**【文章编号】** 2097-2024(2025)08-0377-06

**【DOI】** [10.12206/j.issn.2097-2024.202307014](https://doi.org/10.12206/j.issn.2097-2024.202307014)

## The mechanism of Medicoscab tincture in the treatment of second-degree burns based on network pharmacology and molecular docking technology

ZHANG Qiang<sup>1</sup>, LI Jing<sup>2</sup>, LIU Yue<sup>2</sup>, CHU Xiaoqin<sup>2</sup> (1. Pharmaceutical Department, Nanjing Gulou Hospital Group Anqing Petrochemical Hospital, Anqing 246002, China; 2. School of Pharmacy, Anhui University of Chinese Medicine, Hefei 230012, China)

**【Abstract】Objective** To explore the mechanism of Medicoscab tincture in the treatment of second-degree burns based on network pharmacology and molecular docking technology. **Methods** The effective components of the tincture were screened by the TCMSP; the effective components of the tincture and burn related targets were screened by GeneCards and OMIM database; Cytoscape 3.7.2 software was used to draw “Chinese medicine-disease-effective components-targets” network diagram; the related gene ontology (GO) functions and pathways of the tincture were obtained through GO enrichment analysis and Kyoto encyclopedia of genes and genomes (KEGG) pathway analysis on the targets through Metascape platform; the pathway bubble diagram was constructed by the pathways enriched in the KEGG database, and finally verified by AutoDockTools for molecular alignment. **Results** 19 effective components and 179 target intersections of Medicoscab tincture were selected. GO analysis showed the intervention burns process mainly involved the reaction of inorganic substances, the reaction of cells to nitrogen compounds, and the response to xenobiotic stimuli, as well as biological processes such as membrane rafts, vesicular cavities, transcriptional regulatory factor complexes, receptor complexes, and endoplasmic reticulum cavities. KEGG analysis showed the function mainly includes AGE-RAGE signal pathway, PI3K-Akt signal pathway, IL-17 signal pathway, TNF signal pathway, etc. Analysis of cytoscape software showed the core targets were AKT1, TNF, IL-6, GAPDH, TP53, etc. Molecular docking showed that the active components of Medicoscab tincture were docking with multiple targets, among which  $\beta$ -sitosterol had strong binding activity with AKT1, GAPDH and TP53. **Conclusion** Quercetin, kaempferol, baicalein,  $\beta$ -sitosterol and other core active ingredients in the tincture of making scabs, which could assist in the relief of burns, regulate the signalling pathways such as AGE-RAGE, PI3K-Akt, IL-17, TNF and so on by acting on the targets of AKT1, GAPDH, TP53, IL-6 and so on. This study laid a theoretical foundation for clarifying the mechanism of action of tincture of scab making for the treatment of burn-like diseases.

**【Key words】** medicoscab tincture; burn; network pharmacology; molecular docking technology

**【基金项目】** 安徽省科技重大专项(201903a07020007)

**【作者简介】** 张 强, 本科, 副主任药师, 研究方向: 医院药学和临床药学, Email: [508625@qq.com](mailto:508625@qq.com)

**【通信作者】** 储晓琴, 博士, 教授, 研究方向: 中药制剂技术及质量控制, Tel: 13856929921, Email: [chuxq420@163.com](mailto:chuxq420@163.com)

烧伤通常指热力造成的组织损伤,以皮肤和黏膜损伤为主,严重时甚至会伤及皮下或黏膜下组织<sup>[1-2]</sup>。皮肤是身体中最大的器官,当患者处于深Ⅱ度烧伤时,其需要足够的皮肤移植来治疗创面,但当前所用的表皮替代品和上皮移植因存在排异反应而疗效有限<sup>[3]</sup>。

制痂酊是由黄柏、黄芩、儿茶、冰片组成的临床用于烫伤(Ⅱ度烧伤及以下)、外伤、收敛消炎、抗菌、结痂的特色院内专用复方制剂,收载于《安徽省医院制剂规范》。烧伤的愈合过程与修复机制是现代医学研究的一大难题。在制痂酊中,黄柏、黄芩起清热解毒、泻火燥湿的作用;儿茶能够协助在伤口处形成一层膜,充分发挥防治细菌感染的功效;冰片清凉止痛,通过溶媒乙醇,可增强其穿透力和杀菌作用<sup>[4-5]</sup>。但有关制痂酊的作用机制尚不明确。

网络药理学是探索药物潜在疗效的新兴学科,本研究基于网络药理学对制痂酊进行分析,找寻制痂酊的活性成分以及潜在的治疗靶点通路,以期从宏观上阐释制痂酊对Ⅱ度烧伤的疗效机制。

## 1 方法

### 1.1 制痂酊有效活性成分及相关靶点的筛选

在 TCMSp(<https://tcmsp-e.com/>)上以“黄柏”、“黄芩”、“儿茶”、“冰片”为关键词进行检索,以类药性(DL)≥0.18,口服生物利用度(OB)≥30%作为筛选标准,得到制痂酊的有效活性成分。

以 Uniprot 数据库(<https://www.uniprot.org/>)对有效成分名称进行统一规范<sup>[6]</sup>。

### 1.2 烧伤相关靶点预测

以“burn”为关键词,分别在 OMIM 数据库(<https://omim.org>)、GeneCards 数据库(<https://www.genecards.org/>)和 DisGeNET 数据库(<https://www.disgenet.org>)中进行检索,在此基础上将获得的疾病相关靶点整合并去重复,然后通过 Uniprot 数据库对其名称进行标准统一化<sup>[7]</sup>。利用网站 Jvenn(<http://bioinfo.genotoul.fr/jvenn>)绘制 VENN 图,获得制痂酊治疗烧伤的潜在干预靶点<sup>[8-9]</sup>。

### 1.3 制痂酊有效成分-靶点-疾病网络的构建

将“1.2”项中的潜在干预靶点和药物、疾病相关信息一起导入 Cytoscape 中,构建出制痂酊有效成分-靶点-疾病信息网络<sup>[10]</sup>。

### 1.4 构建 PPI 网络

将“1.2”项中的潜在干预靶点导入 STRING11.5 数据库(<https://www.stringdb.org/>),得到交集靶点蛋白互作(PPI)网络关系,然后将数据导入 Cytoscape

软件进行可视化分析<sup>[11]</sup>,利用“Network Analyzer”功能获得 PPI 拓扑学参数,筛选潜在核心靶点<sup>[12]</sup>。

### 1.5 GO 与 KEGG 通路富集分析

利用 Metascape 数据库(<https://metascape.org/gp/index.html#/main/step1>)进行 GO 和 KEGG 通路富集分析。将获取的 GO 功能富集分析(前 10 条)和 KEGG 通路分析(前 20 条)信息分别绘制出富集气泡图和柱状图<sup>[13]</sup>。

### 1.6 中药有效成分-靶点-疾病通路网络的构建

将 KEGG 富集得到的前 20 条通路与“1.2”项中得到的潜在干预靶点和药物、疾病相关信息一起导入 Cytoscape 中,构建出制痂酊的“有效成分-靶点-疾病”通路信息网络<sup>[14]</sup>。

### 1.7 分子对接

分别选取 Cytoscape 软件分析结果中度值前 5 位的有效成分与潜在作用靶点,先在 TCMSp 数据库和 PCSD PDB 数据库(<https://www.rcsb.org/>)搜索下载小分子化合物和蛋白质的 3D 结构,再通过 AutoDock 软件为小分子加氢、加 ROOT,为蛋白剔除水分子、加氢等,然后选中所有活性位点,通过 AutoDockTools 设置对接盒子进行分子对接,最后利用 Pymol 软件渲染图片并输出结果<sup>[15]</sup>。

## 2 结果

### 2.1 制痂酊有效活性成分及相关靶点

在筛选条件下,黄柏 6 个有效成分,黄芩 5 个有效成分,儿茶 5 个有效成分,冰片 3 个有效成分。删除重复项后纳入制痂酊有效成分共 19 个(表 1)。

### 2.2 烧伤相关靶点

在 OMIM 数据库(<https://omim.org>)、GeneCards 数据库(<https://www.genecards.org/>)和 DisGeNET 数据库(<https://www.disgenet.org>)中进行检索,将先前从数据库所获得的疾病相关靶点进行去重处理,最终得到烧伤靶点 3 280 个。将制痂酊中活性成分相对应靶点基因与疾病靶点基因结合,得到交集,得到 179 个关键蛋白,并绘制韦恩图(图 1)。

### 2.3 PPI 网络

凭借 STRING 数据库进行 PPI 网络分析,共得到 179 个节点、3 602 条边,平均节点度 40.2(图 2)。利用“Cytoscape”软件中“CytoNCA”功能得到其介数中心性、接近中心性、度值<sup>[16]</sup>,通过筛选得到潜在核心靶点(表 2)。

### 2.4 GO 与 KEGG 通路富集分析结果

GO 功能富集分析主要涉及无机物质反应、细胞对氮化合物反应以及对异种刺激的响应等生物



表 1 制痲酊潜在有效化合物

药物	分子ID	活性成分	OB(%)	DL
黄柏	MOL001454	小檗碱	36.86	0.78
黄柏	MOL001458	黄连碱	30.67	0.86
黄柏	MOL002636	Kihadalactone A	34.21	0.82
黄柏	MOL013352	黄柏酮	43.29	0.77
黄柏	MOL002641	异黄柏苷	35.86	0.44
黄柏	MOL000358	$\beta$ -谷甾醇	36.91	0.75
黄芩	MOL001689	刺槐素	34.97	0.24
黄芩	MOL000173	汉黄芩素	30.68	0.23
黄芩	MOL000228	(2R)-7-羟基-5-甲氧基-2-苯基色满-4-酮	55.23	0.20
黄芩	MOL002714	黄芩素	33.52	0.21
黄芩	MOL002908	5,8,2'-三羟基-7-甲氧基黄酮	37.01	0.27
儿茶	MOL002914	黄烷酮	41.35	0.24
儿茶	MOL000422	山柰酚	41.88	0.24
儿茶	MOL000492	(+)-儿茶素	54.83	0.24
儿茶	MOL000073	表儿茶素	48.96	0.24
儿茶	MOL000098	槲皮素	46.43	0.28
冰片	MOL006861	积雪草酸	41.38	0.71
冰片	MOL006862	乙酸龙脑酯	59.3	0.51
冰片	MOL006865	龙脑香醇酮	41.71	0.76

学过程。对 GO-BP、GO-MF、GO-CC 前 10 条信息利用网络平台绘制出柱状图(图 3)<sup>[17]</sup>。KEGG 通路分析得到 154 条通路,筛选得到前 20 条通路进行气泡图绘制(图 4)。

2.5 中药有效成分-靶点-疾病通路网络

将信息导入 Cytoscape, 构建出制痲酊有效成分-靶点-疾病通路信息网络(图 5)。该网络说明制痲酊通过多组分、多靶点、多环节发挥对烧伤的治

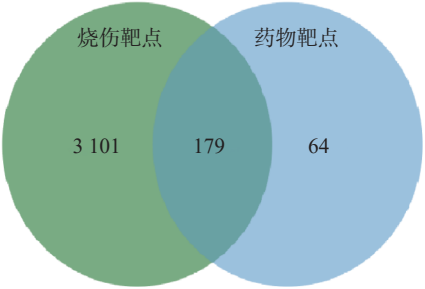


图 1 制痲酊-烧伤 VENN 图

疗作用。

2.6 分子对接验证

以分子对接技术进行验证,通过 Cytoscape 筛选出制痲酊中活性化合物度值最大的前 5 个成分,按照度值选择其中 5 个与 PPI 网络中度值排名前 5 的基因(AKT1、GAPDH、TP53、TNF 和 IL-6)进行分子对接试验,验证其相互作用活性,若结合能 $\leq -20.92$  kJ/mol,表示具有较好的结合活性,若结合能 $\leq -29.30$  kJ/mol,表示具有强烈的结合活性<sup>[18]</sup>。结果显示, $\beta$ -谷甾醇与 AKT1、TNF、GAPDH 有强烈的结合活性;槲皮素、山柰酚与 AKT1、TP53 具有较好的结合活性;汉黄芩素和黄芩素与 5 个基因都具有较好的结合活性(表 3)。化合物的结构如下(图 6),将结合活性高的利用 Pymol 软件绘制并输出对接图片(图 7)。

3 讨论

本研究通过网络药理学手段,构建制痲酊生物

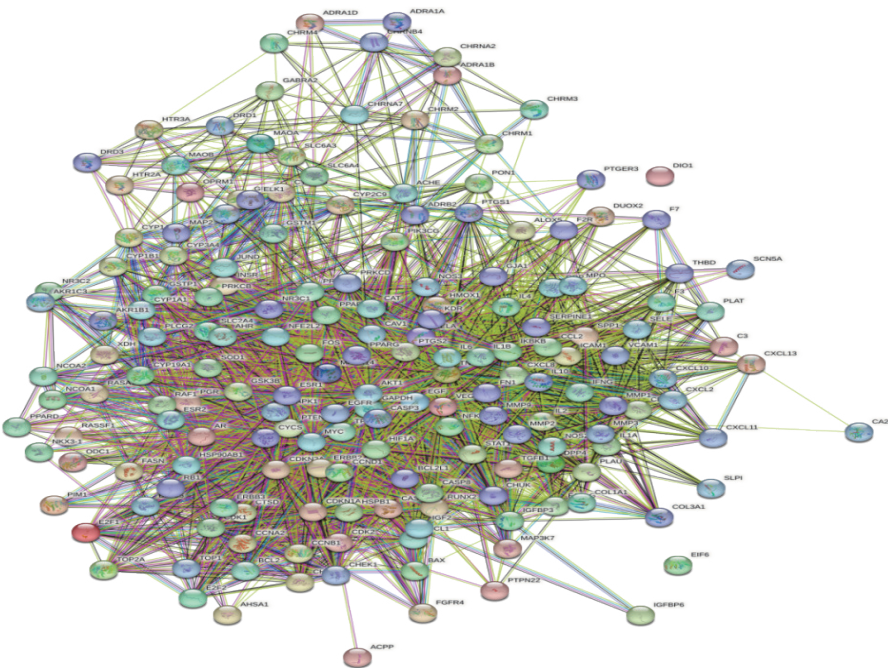


图 2 PPI 网络图

表 2 核心靶点及其拓扑参数

序号	核心靶点	度值	介数中心性	接近中心性
1	AKT1	123	1862.290054	0.004366812
2	GAPDH	116	946.1875691	0.004149378
3	TP53	116	840.5996422	0.004132231
4	IL-6	115	1497.996279	0.004219409
5	TNF	114	1024.117839	0.004166667
6	VEGFA	110	658.4220238	0.004032258
7	CASP3	103	644.9615495	0.003968254
8	IL-1B	101	693.7919839	0.003984064
9	MYC	100	764.1003404	0.003891051
10	PTGS2	99	633.2163159	0.00390625
11	EGFR	99	614.1334934	0.003875969
12	ESR1	99	863.6549212	0.003937008
13	HIF1A	95	434.0180719	0.003787879
14	MMP9	94	600.3164537	0.003787879
15	EGF	93	394.6177813	0.003773585
16	FOS	90	1323.795938	0.003816794
17	PTEN	90	499.5157302	0.003787879
18	CCND1	89	327.1005061	0.003703704
19	PPARG	86	440.0419589	0.003676471
20	FN1	83	283.1020522	0.003676471

信息学网络,初步探究其对烧伤创面愈合的功效机理。制痂酊治疗烧伤的成分主要有槲皮素、山柰酚、汉黄芩素以及 $\beta$ -谷甾醇等。槲皮素能抑制生长因子- $\beta 1$ (TGF- $\beta 1$ )和 TGF- $\beta$ RI 蛋白表达,抗机体纤维化,在角膜碱烧伤后抑制瘢痕形成方面有积极的作用<sup>[19]</sup>。同时,槲皮素可以减少炎症因子(IL-1、

IL-6、IL-10)的表达<sup>[20]</sup>,其抗氧化作用对烧伤后的黏膜也具有一定的保护作用<sup>[21]</sup>。山柰酚也具有优异的抗炎抗氧化作用,同时还能有效抑菌,防止外伤感染<sup>[22]</sup>。汉黄芩素有显著的抗炎、抗氧化应激、抗肿瘤等多种作用<sup>[23]</sup>。 $\beta$ -谷甾醇在抗氧化、抗血脂、抗炎、免疫调节等方面表现出良好的药理作用,可使创面去腐生肌并快速愈合<sup>[24]</sup>。此外, $\beta$ -谷甾醇可以治疗多种疾病,如高脂血症、类风湿性关节炎、免疫抑制、前列腺增生、脱发、烧伤等<sup>[25]</sup>。

PPI 分析结果显示,制痂酊可能是通过 AKT1、GAPDH、IL-6、TNF 等关键蛋白质靶点来辅助缓解烧伤,这可能是烧伤创面愈合的重要作用靶点。蛋白激酶 1(AKT1)是 3 种蛋白激酶之一,其在肿瘤血管成熟、细胞外基质组成和血管的生成等方面起到关键调节作用,同时可促进创面愈合过程中血管的生成和成熟<sup>[26-27]</sup>。GAPDH 具有 DNA 修复、调节蛋白质的表达、参与细胞凋亡的功能<sup>[28]</sup>。IL-6 能够参与炎症反应,用以激活机体免疫,尤其是烧伤导致的炎症。TNF 会抑制转化 TGF- $\beta$  诱导 p38/MAPK 通路激活,导致神经生长因子表达的降低,从而延缓伤口的愈合,促进皮肤细胞去腐生肌,进而缓解疼痛<sup>[29]</sup>。

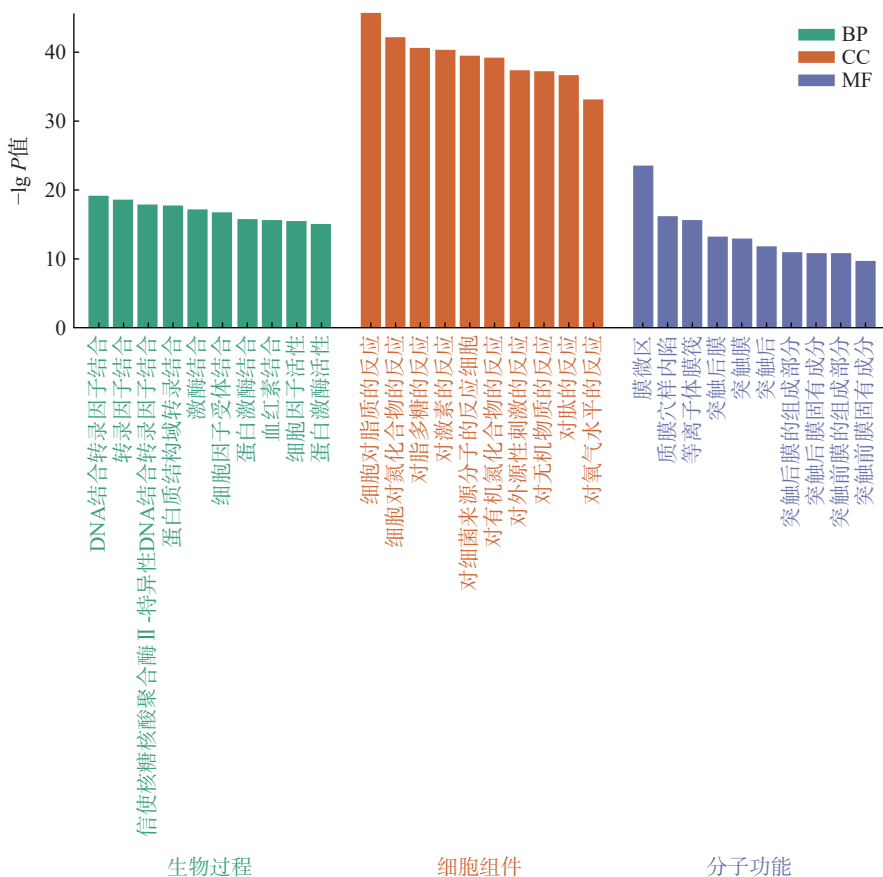


图 3 GO 富集分析

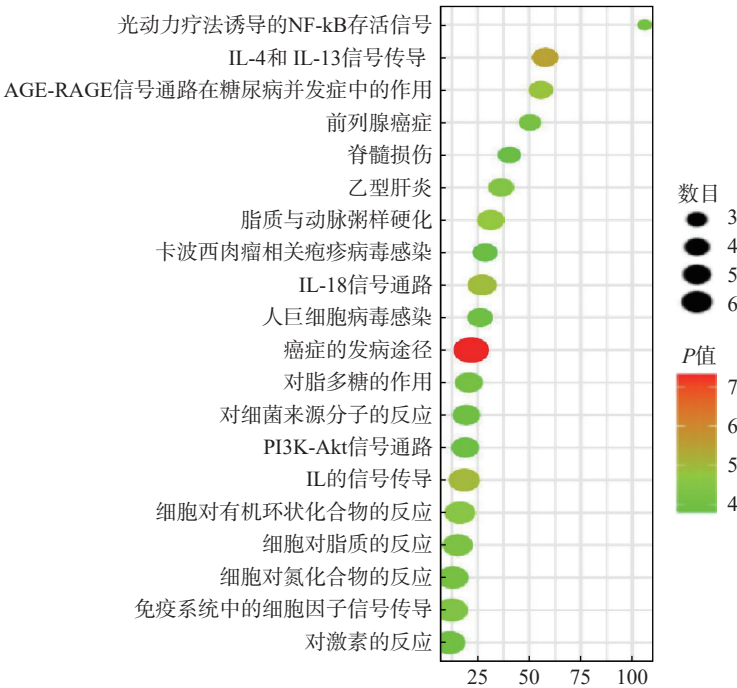


图 4 KEGG 富集分析气泡图

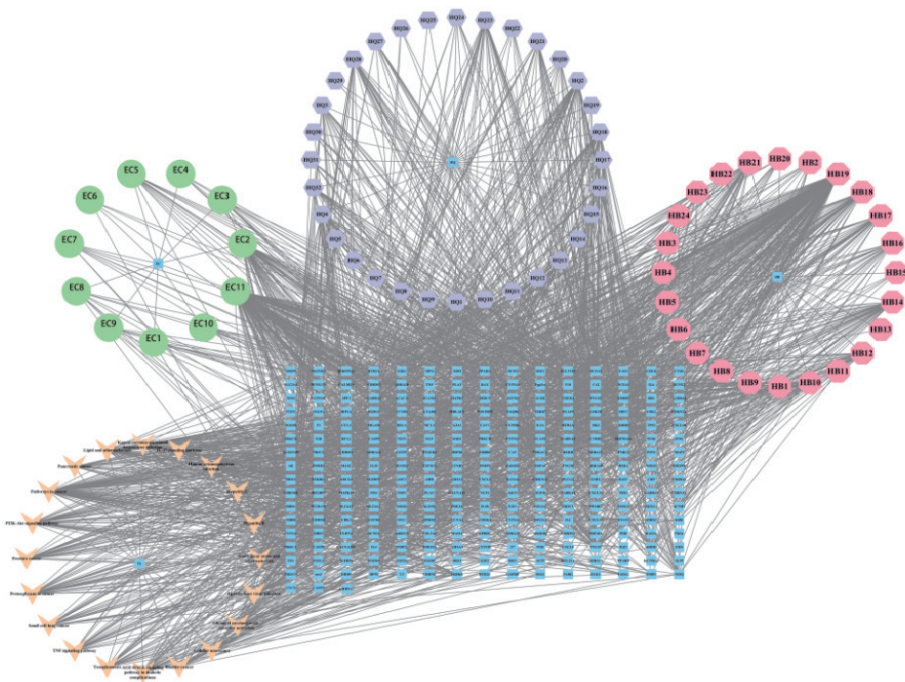


图 5 制痲酊有效成分-靶点-疾病通路信息网络

表 3 制痲酊关键化合物-核心靶点分子对接 (kJ/mol)

核心靶点	槲皮素	山柰酚	汉黄芩素	黄芩素	$\beta$ -谷甾醇
AKT1	-25.10	-25.15	-25.86	-25.48	-31.88
TNF	-20.92	-20.92	-21.13	-23.26	-32.30
IL-6	-18.99	-23.14	-21.13	-23.60	-28.66
GAPDH	-22.68	-21.01	-26.28	-24.43	-33.60
TP53	-22.05	-26.36	-32.01	-27.99	-28.24

通过 KEGG 信号通路分析可知, AGE-RAGE、PI3K-Akt、TNF 等信号通路与烧烫伤创面愈合密

切相关。糖基化终末产物(AGEs)积存于皮肤和创面,对创面愈合有抑制作用。制痲酊能抑制 AGE-RAGE 信号通路介导的炎症反应,改良创面局部微环境<sup>[30]</sup>。PI3K-AKT 参与控制细胞生长和增殖,具有抑制细胞凋亡、促进血管生成有作用<sup>[31]</sup>。综上所述,制痲酊可以通过槲皮素等核心活性成分,作用于 AKT1、GAPDH、IL-6、TNF 等靶点,调节 AGE-RAGE、PI3K-Akt、TNF 等信号通路来



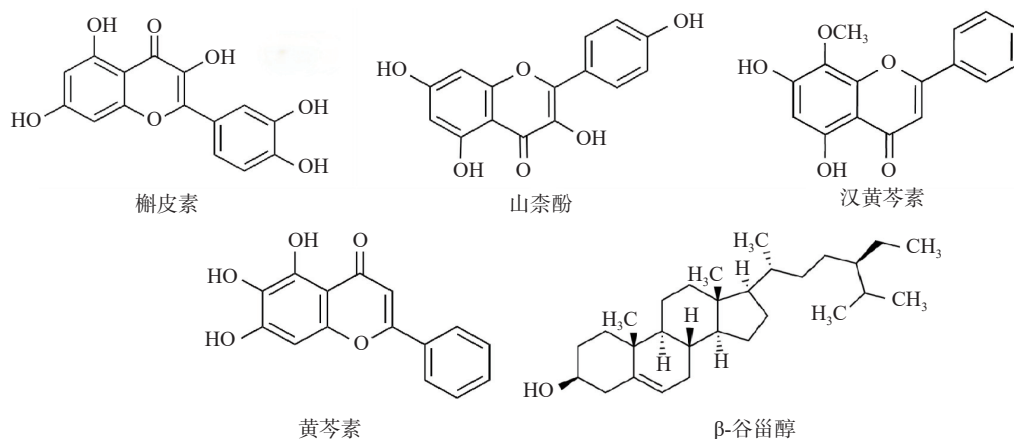


图 6 化合物结构示意图

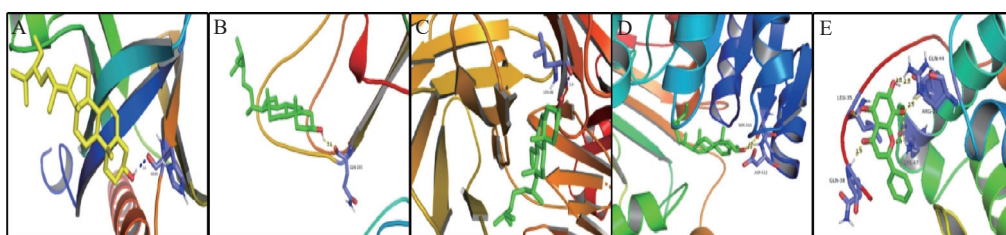


图 7 部分化学成分与靶点的分子对接图

A. AKT1 与 β-谷甾醇; B. TNF 与 β-谷甾醇; C. IL-6 与 β-谷甾醇; D. GAPDH 与 β-谷甾醇; E. TP53 与汉黄芩素

辅助缓解烧伤。本研究通过网络药理学及分子对接技术对制痂酊治疗烧伤进行了系统分析,发现了其潜在的作用靶点,阐明了制痂酊的活性成分、靶点和通路之间相互作用的关系,可为下一步验证制痂酊对以上预测的关键靶点及信号通路的影响提供理论依据,为明确其临床作用机制奠定基础。

## 【参考文献】

- [1] DAI N T, CHANG H I, WANG Y W, et al. Restoration of skin pigmentation after deep partial or full-thickness burn injury[J]. *Adv Drug Deliv Rev*, 2018, 123: 155-164.
- [2] 徐俊涛, 王莹, 马飞, 等. 黄芩素通过抑制 NF-κB 通路对小鼠烧伤愈合的促进作用[J]. *中成药*, 2022, 44(8): 2496-2503.
- [3] AYAZ M. Scrub sponge as a wound debridement device[J]. *Bull Emerg Trauma*, 2021, 9(2): 96-100.
- [4] 李飞龙, 黄赵刚, 程钢, 等. 制痂酊对大鼠深Ⅱ度烧伤的创伤修复及作用机制[J]. *中国药理学通报*, 2021, 37(8): 1164-1168.
- [5] 徐维恒, 程钢, 黄赵刚. 不同辐照剂量<sup>60</sup>Co-γ 对制痂酊灭菌效果的影响[J]. *中成药*, 2012, 34(7): 1267-1270.
- [6] 白银亮, 邓弘扬, 李腾飞, 等. 结合 GEO 测序数据的网络药理学与分子对接探索大黄缓解神经炎症的作用机制[J]. *中国医院药学杂志*, 2023, 43(6): 617-625.
- [7] 胡珊珊, 李洁, 史元元, 等. 基于网络药理学和分子对接法探索复方一枝蒿颗粒治疗新型冠状病毒肺炎的潜在分子机制[J]. *现代药物与临床*, 2022, 37(8): 1710-1717.
- [8] 陈晶晶, 马晓昌. 基于网络药理学分析杞菊地黄丸治疗高血压的作用机制[J]. *中西医结合心脑血管病杂志*, 2022, 20(13): 2315-2321.
- [9] 陈冠廷, 崔应麟. 基于网络药理学与实验验证探讨益气通脉方治疗缺血性中风作用机制[J]. *中药药理与临床*, 2022, 38(5): 83-92.
- [10] 彭丽琪, 唐燕萍, 蔡虎志, 等. 基于网络药理学探讨“黄芪-桂枝”治疗慢性心力衰竭的作用机制[J]. *湖南中医杂志*, 2022, 38(2): 140-148.
- [11] 岳慧英, 蔡东晖, 裴科, 等. 黄芪治疗 2 型糖尿病的网络药理学研究[J]. *广东化工*, 2021, 48(6): 37-39.
- [12] 刘春媛, 刘晓菲, 孙颖, 等. 基于网络药理学及分子对接探讨透脓散以 IL-6 为核心的免疫炎症调控干预肉芽肿性乳腺炎的机制及验证研究[J]. *中医药信息*, 2023, 40(1): 43-51.
- [13] HE S, WANG T Q, SHI C W, et al. Network pharmacology-based approach to understand the effect and mechanism of Danshen against anemia[J]. *J Ethnopharmacol*, 2022, 282: 114615.
- [14] 张宇欣, 刘魏魏, 杨娟, 等. 基于网络药理学和分子对接探讨常见酚酸提高机体免疫力的作用机制[J]. *食品工业科技*, 2023, 44(2): 29-40.
- [15] ZHANG L L, HAN L, WANG X M, et al. Exploring the mechanisms underlying the therapeutic effect of *Salvia miltiorrhiza* in diabetic nephropathy using network pharmacology and molecular docking[J]. *Biosci Rep*, 2021, 41(6): BSR20203520.
- [16] 李泽宇, 郝二伟, 曹瑞, 等. 拆方理论结合网络药理学考证利湿名方五苓散保护肾功能的配伍合理性[J]. *中药药理与临床*, 2023, 39(6): 8-16.
- [17] 赵建伟, 张文贤, 林德民, 等. 基于网络药理学探究冰清膏促进深Ⅱ度烧伤创面愈合的作用机制[J]. *中国医药科学*, 2022, 12(9): 23-27.
- [18] 马红梅, 刘佳铭, 陈奇祺, 等. 基于网络药理学、分子对接和动物实验探究柴胡龙骨牡蛎合甘麦大枣汤治疗脑卒中后抑郁的作用机制[J]. *中国免疫学杂志*, 2024, 40(5): 1082-1088, 1095.

(下转第 399 页)

表 3 15 批麝香接骨胶囊中 7 种成分含量测定结果 (mg/g, n=2)

编号	儿茶素	表儿茶素	羟基红花黄色素A	芍药苷	阿魏酸	柚皮苷	藁本内酯
S1	6.96	2.66	0.43	2.05	0.28	0.10	2.59
S2	2.13	4.70	0.97	4.10	0.16	0.20	2.78
S3	6.59	3.13	0.57	5.53	0.27	0.14	2.13
S4	7.24	5.14	0.95	7.04	0.20	0.23	2.15
S5	1.98	4.53	1.03	5.81	0.11	0.19	2.50
S6	6.00	3.58	1.12	6.14	0.29	0.14	2.14
S7	5.94	3.57	1.24	5.08	0.10	0.09	2.12
S8	2.02	4.54	1.31	2.98	0.29	0.21	3.01
S9	6.22	4.64	1.25	3.62	0.28	0.19	2.18
S10	2.39	3.10	1.23	2.62	0.15	0.20	1.78
S11	5.73	3.22	0.49	5.45	0.18	0.10	2.06
S12	2.63	4.25	1.91	5.49	0.17	0.25	2.87
S13	1.09	2.76	0.54	1.26	0.10	0.07	2.08
S14	7.02	4.85	1.36	7.05	0.29	0.18	2.15
S15	3.63	3.76	0.94	7.49	0.17	0.10	1.96

具有较高的重现性、稳定性,但各厂家之间 7 种指标性成分含量差异大,也从一定程度上反映出不同厂家使用的药材质量参差不齐,建议厂家严格控制药材质量,以保证成品安全、有效、稳定。本研究所建的特征图谱及指标性成分的含量测定方法为麝香接骨胶囊质量标准和质量控制提供有力的技术支持。

【参考文献】

[1] 国家药典委员会. 中国卫生部药品标准中药成方制剂: 第五册 [S]. 1999: 209.

[2] 单婷婷, 陈玉敏, 水彩红, 等. 高效液相色谱法测定麝香接骨胶囊中伪麻黄碱和麻黄碱的含量 [J]. 中国医药指南, 2013, 11(9): 94-95.  
[3] 陈玉敏, 曹红, 邢俊波, 等. 麝香接骨胶囊中松香酸检测的研究 [J]. 中华中医药杂志, 2014, 29(9): 2982-2984.  
[4] 罗士香. 麝香接骨胶囊质量标准的研究 [J]. 安徽医药, 2004, 8(6): 459.  
[5] 单婷婷, 曹红, 邢俊波, 等. HPLC 法测定麝香接骨胶囊中四种生物碱的含量 [J]. 解放军药学学报, 2013, 29(5): 450-452.  
[6] 国家药典委员会. 中华人民共和国药典(一部)2020 年版 [S]. 北京: 中国医药科技出版社, 2020: 10, 42, 139, 157, 165, 267.

【收稿日期】 2023-07-22 【修回日期】 2024-04-23  
【本文编辑】 费永和

(上接第 382 页)

[19] 刘彦芳, 秦莉, 张达, 等. 槲皮素对大鼠角膜碱烧伤后瘢痕形成的影响 [J]. 西安交通大学学报(医学版), 2010, 31(1): 92-96.  
[20] LI Y, YAO J Y, HAN C Y, et al. Quercetin, inflammation and immunity[J]. Nutrients, 2016, 8(3): 167.  
[21] 孟德胜, 汪仕良. 槲皮素等对烫伤后小鼠肠粘膜损伤的保护作用 [J]. 中国药理学通报, 2000, 16(6): 673-675.  
[22] 廖智慧, 廖丽秀, 邱李湘, 等. 湘西地区军事本草植物资源研究(Ⅱ)治疗创伤药用植物调查分析 [J]. 亚热带植物科学, 2022, 51(4): 288-298.  
[23] 王斯楚, 孙一, 王晓溪, 等. 汉黄芩素对肺炎支原体肺炎小鼠肺组织中肺上皮间质形成因子表达的影响 [J]. 中草药, 2023, 54(1): 172-180.  
[24] 郭洪伟, 刘一涵, 田云刚, 等. 复方桐叶烧烫伤油及其原料脂溶性成分分析 [J]. 中成药, 2021, 43(10): 2906-2909.  
[25] 王旭红, 刘改霞, 李耀辉, 等. 基于网络药理学探寻 β-谷甾醇的作用机制 [J]. 世界中医药, 2022, 17(2): 172-176.  
[26] SAHLBERG S H, MORTENSEN A C, HAGLÖF J, et al. Different functions of AKT1 and AKT2 in molecular pathways,

cell migration and metabolism in colon cancer cells[J]. Int J Oncol, 2017, 50(1): 5-14.  
[27] SOMANATH P R, CHEN J H, BYZOVA T V. Akt1 is necessary for the vascular maturation and angiogenesis during cutaneous wound healing[J]. Angiogenesis, 2008, 11(3): 277-288.  
[28] 禹淞文, 李清明. 甘油醛-3-磷酸脱氢酶的应用进展 [J]. 农产品加工(学刊), 2014, (9): 51-53.  
[29] OHTA M, CHOSA N, KYAKUMOTO S, et al. IL-1β and TNF-α suppress TGF-β-promoted NGF expression in periodontal ligament-derived fibroblasts through inactivation of TGF-β-induced Smad2/3-and p38 MAPK-mediated signals[J]. Int J Mol Med, 2018, 42(3): 1484-1494.  
[30] GUGLIUCCI A. Formation of fructose-mediated advanced glycation end products and their roles in metabolic and inflammatory diseases[J]. Adv Nutr, 2017, 8(1): 54-62.  
[31] WANG J L, WU M H. The up-regulation of miR-21 by gastrodin to promote the angiogenesis ability of human umbilical vein endothelial cells by activating the signaling pathway of PI3K/Akt[J]. Bioengineered, 2021, 12(1): 5402-5410.

【收稿日期】 2023-07-05 【修回日期】 2024-07-01  
【本文编辑】 李春德