



ISSN 1674-8999
CN 41-1411/R

ZHONGYI XUEBAO

中 医 学 报

ACTA CHINESE MEDICINE

中国科技论文统计源期刊
中华中医药学会系列杂志
RCCSE中国核心学术期刊
T1级优秀中医药科技期刊
中国科技核心期刊



ISSN 1674-8999



9 771674 899221



主办 河南中医药大学
中华中医药学会

2022 **2**
2022年2月 第37卷 第2期

缩泉润肠方对便秘模型大鼠结肠组织中水通道蛋白的影响	潘姣, 张晓雨, 孙光军, 林爱珍	360
基于 NF - κ B/COX - 2 信号通路探讨芍药内酯苷对溃疡性结肠炎模型大鼠的影响	黄梅, 颜景颖	365
大蒜素对大鼠深 II 度烧伤创面微循环的改善作用	凌书建, 杨丽萍, 陶剑光, 王小飞, 苏晓利, 王杰	371
基于 TLR4/NF - κ B 炎性轴探讨针灸联合感觉运动训练对膝骨关节炎模型大鼠运动能力的 改善作用	赵玉伟, 刘志昂, 车文生, 孙晓东	376
• 方药研究 •		
基于网络药理学和分子对接分析豆根管食通口服液治疗食管癌的分子机制	邝玉慧, 陈欣菊, 徐方飏, 陈晓琦, 郑玉玲	383
• 临床研究 •		
银丹解毒颗粒治疗 SARS - CoV - 2 变异株 B. 1. 1. 7 COVID - 19 临床观察	任婕, 刘遥, 吴秀艳, 王宪波	391
蔡氏内异 I 号方治疗子宫内膜异位症	谢丹丹, 张婷婷, 庄梦斐, 曹阳, 陆黎娟	397
益气活血方治疗非 ST 段抬高型心肌梗死心源性晕厥	曹云艳	402
扶正解毒方辨治弥漫大 B 细胞淋巴瘤免疫逃逸的临床研究	朱逸东, 甘欣锦	408
掀针联合胃复安穴位注射治疗化疗相关恶心、呕吐	黄银凤, 罗磊, 宋丽丽, 李志刚	413
邵氏组方配突三针治疗甲状腺良性结节	吴金苗, 张君, 陈建辉	417
• 中医文献 •		
中成药联合 ARB 或 ACEI 治疗 IgA 肾病的网状 Meta 分析	楼妍, 袁军, 付彤飞, 吴健, 阮冬冬	422
中医药治疗溃疡性结肠炎热点主题和前沿趋势可视化分析	邵文雪, 许二平	431
益肾祛痰活血法治疗血管性痴呆的有效性与安全性评价	董新刚, 芦猛, 赵云, 李伟峰	439
肺癌中医证候诊断规范研究现状及思考	刘文瑞, 冯贞贞, 谢洋, 李建生	447

• 方药研究 •

基于网络药理学和分子对接分析豆根管食通口服液治疗食管癌分子机制*

邝玉慧¹ 陈欣菊² 徐方飏¹ 陈晓琦² 郑玉玲²

1. 河南中医药大学 河南 郑州 450046; 2. 河南中医药大学第一附属医院 河南 郑州 450000

摘要:目的:通过网络药理学和分子对接技术分析豆根管食通口服液治疗食管癌的分子机制。方法:检索多个数据库并筛选豆根管食通口服液有效活性成分和其作用于食管癌(esophageal carcinoma, EC)的相关靶点,并采用Cytoscape软件分别构建“药物-活性成分-靶点”“靶点-通路”网络图;采用CytoHubba插件中多种算法筛选豆根管食通口服液治疗EC关键靶点,并采用R软件对关键靶点进行基因本体(gene discovery, GO)生物功能富集分析和京都基因与基因组百科全书(kyoto encyclopadia of genes and genomes, KEGG)信号通路富集分析;采用分子对接技术对有效活性化合物和靶蛋白的结合能力进行验证。结果:从豆根管食通口服液方中药中共筛选出59种活性成分,治疗EC靶点106个,其中关键靶点21个。KEGG信号通路富集分析发现,关键靶点主要富集在白细胞介素-17(interleukin 17, IL-17)信号通路、缺氧诱导因子-1(hypoxia inducible factor-1, HIF-1)信号通路、肿瘤坏死因子(tumor necrosis factor, TNF)信号通路等107个通路;GO生物功能富集分析发现,关键靶点主要涉及DNA结合转录因子活性的调节、细胞对氧化应激的反应等1341个生物过程,丝裂原活化蛋白激酶(mitogen activated protein kinases, MAPK)活性、生长因子活性等59个分子功能,细胞定位在囊泡腔、膜区等26个细胞组分。分子对接提示药物活性成分β-谷甾醇、山柰酚、槲皮素与表皮生长因子受体和MAPK3靶点对接良好。结论:豆根管食通口服液治疗EC具有多成分、多途径、多靶点的优势。

关键词:豆根管食通口服液;食管癌;网络药理学;分子对接;作用机制

DOI: 10.16368/j.issn.1674-8999.2022.02.073

中图分类号:R285.6 文献标志码:A 文章编号:1674-8999(2022)02-0383-08

Molecular Mechanism of Dou Gen Guan Shi Tong Oral Liquid in Treatment of Esophageal Cancer Based on Network Pharmacology and Molecular Docking

KUANG Yuhui¹, CHEN Xinju², XU Fangbiao¹, CHEN Xiaoqi², ZHENG Yuling²

1. Henan University of Chinese Medicine Zhengzhou Henan China 450046; 2. The First Affiliated Hospital of Henan University of Chinese Medicine Zhengzhou Henan China 450000

Abstract: Objective: Analyze the molecular mechanism of Dou Gen Guan Shi Tong Oral Liquid in treatment of esophageal cancer through network pharmacology and molecular docking technology. Methods: Search through multiple databases and screen the effective active ingredients of Dou Gen Guan Shi Tong Oral Liquid and its related targets for esophageal carcinoma (EC), and use Cytoscape software to construct "drug-active ingredient-target" and "target-pathway" network diagrams. Using multiple algorithms in the Cyto Hubba plug-in to screen the key targets of Dougen Guan Shitong Oral Liquid for the treatment of EC. And use R software to conduct gene ontology (GO) biological function enrichment analysis and Kyoto encyclopadia of genes and genomes (KEGG) pathway enrichment analysis for key targets. Furthermore, molecular docking technology is used to verify the binding ability of the

* 基金项目:国家自然科学基金青年项目(81804063);中国博士后科学基金面上项目(2019M662500);河南省中医药研究专项课题项目(2018ZY2032)