

基于网路药理学方法预测青风藤药理机制<sup>\*</sup>

蔡强<sup>1</sup> 向莹<sup>2</sup> 岳涛<sup>1\*\*</sup>

(1. 上海中医药大学附属光华医院, 上海 200052; 2. 安徽中医药大学中西医结合学院, 安徽 合肥 230012)

**摘要:**目的 应用网络药理学方法预测青风藤可能的药理机制, 为该药物的合理使用和深度研发提供新的研究策略。方法 借助中药系统药理学数据库 (TCMSPTM), 挖掘青藤碱中已知化合物的生物学信息, 筛选相似药物及与青藤碱相关性高的疾病, 获取高相似度药物的编号和高相关性疾病的对应靶标, 构建青风藤化合物靶标“成分-靶点-疾病”相互作用网络。结果 除已知的抗类风湿等药理作用外, 青风藤在肿瘤、自身免疫性疾病等领域发挥作用; 青风藤化合物成分青藤碱与 16-epi-Isositsirikine 在治疗多种自身免疫性疾病中发挥作用。结论 网络药理学研究方法挖掘青风藤既有知识之间的联系, 通过分析对应靶标间相互关系及直接作用模式, 揭示潜在的抗肿瘤、抗炎等活性, 为其相应的分子药理机制研究提供新的方向。

**关键词:**网络药理学; 青风藤; 药理; 预测靶点

中图分类号: R284 文献标识码: A 文章编号: 1672-0571(2019)02-0108-05

DOI: 10.13424/j.cnki.mtcm.2019.02.032

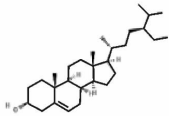
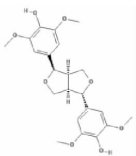
中国药典中记载的药用青风藤来源于防己科植物青藤 *Sinomeni-um acutum* (Thunb.) Rehd. et Wils. 及毛青藤 *S. acutum* (Thunb.) Rehd. et Wils. var. *cinereum* Rehd. et Wils. 的干燥根茎。本研究收集的青风藤的 16 个已知化学成分来源于中药系统药理学数据库 (TCMSPTM)。基于青风藤药效物质基础本研究建立并分析青风藤药物-靶

点-疾病网络, 通过应用网络药理学分析青风藤的药理作用分子机制, 包括药物靶标相互作用网络的整体特征分析, 药物-靶标-疾病网络的分析, 新药靶点的预测等。旨在为该药物的合理使用和深度研发提供新的研究策略。

1 青风藤药效物质基础

见表 1。

表 1

Molecule ID	Molecule name	OB (%)	BBB	DL	MW	structure
MOL000358	beta-sitosterol (β-谷固醇)	36.91	0.99	0.75	414.79	
MOL000365	Syringaresinol (丁香脂素)	3.29	-0.03	0.72	418.48	

\* 基金项目: 上海市中医药事业发展三年行动计划 (ZY3-CCCX3-3021)

\*\* 通讯作者: 岳涛, 主任医师。E-mail: yuetao0701@163.com