

加味通幽汤主要功效物质的网络药理学研究

解可然 钟莲 谢跃生^{通讯作者}

华北理工大学, 河北唐山, 063210;

摘要: 目的: 探究加味通幽汤抗食管癌的主要药效物质基础。方法: 网络药理学挖掘对加味通幽汤抗食管癌药效成分进行预测分析。结果: 1 网络药理学结合文本挖掘筛选出加味通幽汤抗食管癌药效成分为槟榔碱、阿魏酸、异阿魏酸、羟基红花黄色素 A、苦杏仁苷、野黄芩苷、槲皮素。结论: 对加味通幽汤抗食管癌药效成分预测所得 7 个主要成分可为加味通幽汤抗食管癌药效物质基础研究提供大数据支持。

关键词: 加味通幽汤; 网络药理学

DOI: 10. 69979/3029-2808. 25. 02. 007

1 基于网络药理学预测加味通幽汤抗食管癌药效物质基础

1.1 实验方法与结果



图 1 技术流程图

1.2 加味通幽汤化学成分及其靶点的收集和筛选

因加味通幽汤的给药方式主要为口服, 在 TCMS 数据库中搜索复方中药材的化学成分时依据标准为 Lipinski 规则 (分子量 < 500; 氢键供体数目 < 5; 氢键受体数目 < 10; 脂水分配系数 < 5) 进行类药性分析, 选择药材活性成分, 符合 Lipinski

规则的化合物在生物体内代谢过程中生物利用度更高。按照口服生物利用度 ≥ 30% 的标准进一步筛选活性成分, 其筛选结果如表 1 至表 6 所示。加味通幽汤符合药效靶点的选取具体方法如下: 利用 pubchem 数据库将潜在活性成分都转 SMILES 格式, 将其导入 Swiss Target Prediction 在线分析平台, 将属性设置为 “Homo sapiens” 后进行预测, 把潜在活性成分靶点以 csv 格式导出。

表 1 红花成分 ADME 参数描述

表 2 杏仁成分 ADME 参数描述						
Molecule Name	MW	AlogP	Hdon	Hacc	OB%	
2,3-didehydro GA77	346.41	0.28	3	6	88.08	
(2R)-2-hydroxy-2-phenylacetic acid	152.16	0.92	2	3	43.67	
phenylmethanol	108.15	1.23	1	1	58.68	
tridec-1-en-3,5,7,9,11-pentayne	162.19	4.3	0	0	37.14	
(3R)-hexan-3-ol	102.2	1.87	1	1	80.12	
L-2-Amino-3-(5-hydroxyindolyl)propionic acid	220.25	0.98	5	4	74.63	

Molecule Name	MW	AlogP	Hdon	Hacc	OB%
o-xylene	106.18	2.8	0	0	45.55
p-xylene	106.18	2.8	0	0	48.74
l-Verbenone	150.24	1.94	0	1	50.66
nonanal	142.27	3.22	0	1	40.28
(7aS)-4,4,7a-trimethyl-6,7-dihydro-5H-benzofuran-2-one	180.27	2.48	0	2	36.84
adenine	135.15	-0.58	3	4	62.81
salicylic acid	138.13	1.17	2	3	32.13
hexanoic acid	116.18	1.81	1	2	73.08
(E)-1,3-Tridecadiene-5,7,9,11-tetrayne	164.21	4.18	0	0	37.3
hexenal	98.16	1.83	0	1	46.01
ethylbenzene	106.18	2.77	0	0	49.38
ethone	148.23	1.61	0	3	40.81
aldehydo-D-galactose	180.18	-2.68	5	6	47.81
oxaldehydic acid	74.04	-0.43	1	3	32.25

注: MW-分子量, AlogP-脂水分配系数, Hdon-氢键供体数目, Hacc-氢键受体数目, OB%-口服生物利用度

7-Chloro-2,4-quinolinedicarboxylic acid	166.23	4.06	0	0	33.32
(2R)-hexan-2-ol	102.2	1.8	1	1	43.94
(3Z,11E)-trideca-1,3,11-trien-5,7,9-triyne	166.23	4.06	0	0	41.57
2,4-Dichloro-5-([(E)-(4-chlorophenyl)methylidene]amino)benzoic acid	168.25	3.93	0	0	36.62
7,8-dimethyl-1H-pyrimido[5,6-g]quinoxaline-2,4-dione	242.26	0.59	2	6	45.75
(Z)-2-methyl-5-[(1R,2S,4S)-2-methyl-3-methylene-2-norbornanyl]pent-2-en-1-ol	220.39	3.66	1	1	62.85
1,11(Z)-Tridecadien-3,5,7,9-tetrayne	164.21	4.18	0	0	43.51
1,3-benzothiazole	135.2	1.91	0	1	70.33
cumalic acid	140.1	-0.11	1	4	43.1
cyclododecanol	184.36	4.24	1	1	41.45
3-Phenylpropanoic acid	150.19	1.93	1	2	35.83
4-[(Z)-3-hydroxyprop-1-enyl]-2,6-dimethoxyphenol	210.25	1.39	2	4	49.15
3-(4-hydroxy-3-methoxy-phenyl)acrylic acid	194.2	1.62	2	4	39.56
kaempferol	286.25	1.77	4	6	41.88
(-)-Caryophyllene oxide	220.39	3.52	0	1	32.67
luteolin	286.25	2.07	4	6	36.16
(S)-p-Menth-1-en-4-ol	154.28	2.55	1	1	81.41
(-)-alpha-cedrene	204.39	4.12	0	0	55.56
hyacinthin	120.16	1.52	0	1	38.65

注：MW-分子量，AlogP-脂水分配系数，Hdon-氢键供体数目，Hacc-氢键受体数目，OB%-口服生物利用度

表 3 升麻成分 ADME 参数描述

Molecule Name	MW	AlogP	Hdon	Hacc	OB%
liquified Phenol	94.12	1.56	1	1	36.05
furol	96.09	0.99	0	2	34.35
3-methylbut-2-enoic acid	100.13	1.32	1	2	62.32
hexanal	100.18	1.85	0	1	55.71
valeric acid	102.15	1.35	1	2	70.74
artificial Almond Oil	106.13	1.59	0	1	32.63
phenylmethanol	108.15	1.23	1	1	58.68
4-Methylphenol	108.15	2.05	1	1	51.99
o-cresol	108.15	2.05	1	1	62.45
1-(1H-Pyrrol-2-yl)ethanone	109.14	0.96	1	1	58.37
5-Methylfuran-2-carbaldehyde	110.12	1.13	0	2	43.92
hexanoic acid	116.18	1.81	1	2	73.08
indole	117.16	2.12	1	0	34.38
hyacinthin	120.16	1.52	0	1	38.65
2-phenylethanol	122.18	1.55	1	1	44.03
guasol	124.15	1.55	1	2	51.6
cinnamaldehyde	132.17	1.95	0	1	31.99
2-Amylfuran	138.23	3.12	0	1	54.59
nonanal	142.27	3.22	0	1	40.28
anethole	148.22	2.77	0	1	32.49

注：MW-分子量，AlogP-脂水分配系数，Hdon-氢键供体数目，

Hacc-氢键受体数目，OB%-口服生物利用度

表 4 半枝莲成分 ADME 参数描述

Molecule Name	MW	AlogP	Hdon	Hacc	OB%
1-(4-hydroxyphenyl)acetone	150.19	1.19	1	2	32.53
phenylmethanol	108.15	1.23	1	1	58.68
furol	96.09	0.99	0	2	34.35
hexenal	98.16	1.83	0	1	46.01
gamma-Hexenol	100.18	1.44	1	1	57.32
hexanal	100.18	1.85	0	1	55.71
benzaldehyde	106.13	1.59	0	1	32.63
coumaran	120.16	1.89	0	1	50.9
hyacinthin	120.16	1.52	0	1	38.65
benzoic acid	121.12	0.76	0	2	31.55
2-phenylethanol	122.18	1.55	1	1	44.03
(3R)-oct-1-en-3-ol	128.24	2.53	1	1	32.79
cinnamaldehyde	132.17	1.95	0	1	31.99
2-pentylfuran	138.23	3.12	0	1	54.59
(4R)-1-methyl-4-propan-2-yl cyclohexene	138.28	3.7	0	0	33.17
6-Hydroxynaringenin	288.27	2.03	4	6	33.23
thymol	150.24	3.24	1	1	41.47

注：MW-分子量，AlogP-脂水分配系数，Hdon-氢键供体数目，Hacc-氢键受体数目，OB%-口服生物利用度

表 5 槟榔成分 ADME 参数描述

Molecule Name	MW	AlogP	Hdon	Hacc	OB%
cimigenol	488.78	3.53	3	5	37.19

arekolin	155.22	0.74	0	3	40.7
(R)-linalool	154.28	2.74	1	1	39.8
guvacoline	141.19	0.21	1	3	32.67
1-chloro-4-(4-chlorophenyl)sulfonylbenzene	287.17	4.26	0	2	70.57
dehydeoacetic acid	168.16	-0.29	0	4	52.02
diethyl benzene-1,2-dicarboxylate	222.26	2.24	0	4	52.19
L-Limonen	136.26	3.5	0	0	38.09
butylated hydroxytoluene	220.39	4.85	1	1	40.02
2-lauroleic acid	198.34	4.52	1	2	31.42
panosorb	112.14	1.34	1	2	30.82
(2S)-2-amino-3-phenylpropanoic acid	165.21	0.96	3	3	41.62
isomenthol	156.3	2.78	1	1	55.3
homoarecoline	169.25	1.09	0	3	52.03

注：MW-分子量，AlogP-脂水分配系数，Hdon-氢键供体数目，Hacc-氢键受体数目，OB%-口服生物利用度

表 6 白花蛇舌草成分 ADME 参数描述

Molecule Name	MW	AlogP	Hdon	Hacc	OB%
2,3-dimethoxy-6-methanthraquinone	282.31	3.26	0	4	34.86
scandoside_qt	228.22	-1.79	4	6	30.02
3'-Hydroxyanethole	164.22	1.68	1	2	30.01
(E)-3-(4-methoxyphenyl)prop-2-enoic acid	178.2	1.89	1	3	31
deacetylasperulosidic acid_qt	228.22	-1.79	4	6	30.29
deacetyl asperuloside acid_qt	242.25	-1.54	3	6	62.46
geniposidic acid_qt	212.22	-0.76	3	5	30.96
p-coumaric acid	164.17	1.64	2	3	43.29
2-methoxy-3-methyl-9,10-an	252.28	3.28	0	3	37.83

thraquinone					
3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)prop-2-enoic acid	194.2	1.62	2	4	39.56
quercetin	302.25	1.5	5	7	46.43

注：MW-分子量，AlogP-脂水分配系数，Hdon-氢键供体数目，Hacc-氢键受体数目，OB%-口服生物利用度

1.3 加味通幽汤抗食管癌作用靶点分析

在 GeneCards、OMIM、TTD 疾病靶点数据库中以“esophageal carcinoma”为关键词，设置属性为“Homo sapiens”，检索食管癌相关的靶点。将疾病靶点与活性成分靶点进行交集，得到加味通幽汤抗食管癌靶点 149 个。

参考文献

[1] 张春云, 李泽彦, 冯丽学, 等. 猫爪草治疗结直肠癌的网络药理学分析和分子对接预测[J]. 高师理科学刊, 2025, 45(02): 50-56+62.

[2] 张文文, 王春英, 夏玲玲, 等. 基于网络药理学探讨蒺藜子的抗氧化作用机制[J]. 黑龙江科学, 2025, 16(04): 116-119.

[3] 张贤睿, 张江山, 咎珂, 等. 基于网络药理学和分子对接探讨鲜竹沥治疗脑卒中的分子机制[J]. 现代医药卫生, 2025, 41(02): 313-318.

作者简介：解可然（2004.08），女，汉族，河北石家庄人，本科，华北理工大学，研究方向为中药学。