

基于网络药理学和分子对接技术探究裸花紫珠治疗急性胃炎的作用机制



张明晓¹, 刘凤祺¹, 丁兴华¹, 葛 蒲²

1. 潍坊护理职业学院药学系 (山东潍坊 262500)
2. 北京中医药大学中医学院 (北京 100029)

【摘要】目的 通过网络药理学和分子对接技术探究裸花紫珠治疗急性胃炎 (acute gastritis, AG) 的作用机制。**方法** 通过 SymMap 数据库和文献检索裸花紫珠化学成分, 结合 Swiss Target Prediction 平台搜索成分靶点; 通过 GeneCards 和 OMIM 数据库搜索疾病靶点。利用 STRING 数据库结合 Cytoscape 3.8.2 软件平台构建蛋白质-蛋白质相互作用 (protein-protein interaction, PPI) 网络, 筛选关键作用靶点。通过 DAVID 在线分析工具对核心靶标进行京都基因与基因组百科全书 (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes, KEGG) 富集分析及基因本体论 (Gene Ontology, GO) 富集分析。运用 Cytoscape 3.8.2 软件建立“成分-关键靶点-通路”多维网络模型, 系统解析核心活性成分的作用机制。最后对核心成分和核心靶点进行分子对接验证。**结果** 共筛选得到裸花紫珠 17 个化学成分, 对应 333 个成分靶点和 1 239 个疾病靶点, 将成分靶点和疾病靶点取交集得到 115 个靶点。通过 PPI 网络分析, 得到 AKT1、TNF、IL6 等 43 个核心靶点。KEGG 富集分析得到 PI3K-Akt、AGE-RAGE 等信号通路。通过“成分-核心靶点-通路”图预测得到咖啡酸、芥子醛、藿香黄酮醇等关键成分。分子对接结果表明, 关键成分和关键靶点之间存在氢键作用、疏水作用等较强的分子间相互作用, 表明两者具有较高的亲和力。**结论** 裸花紫珠可通过多成分、多靶点、多通路对 AG 发挥作用, 为裸花紫珠治疗 AG 提供了理论依据。

【关键词】 裸花紫珠; 急性胃炎; 网络药理学; 分子对接; 作用机制

【中图分类号】 R 573.3 **【文献标识码】** A

The mechanism of Callicarpa Nudiflora Folium in the treatment of acute gastritis based on network pharmacology and molecular docking technology

ZHANG Mingxiao¹, LIU Fengqi¹, DING Xinghua¹, GE Pu²

1. Department of Pharmacy, Weifang Nursing Vocational College, Weifang 262500, Shandong Province, China

2. School of Traditional Chinese Medicine, Beijing University of Chinese Medicine, Beijing 100029, China

Corresponding author: ZHANG Mingxiao, Email: zmx18223@163.com

【Abstract】Objective To investigate the mechanism of Callicarpa Nudiflora Folium (CNF) in the treatment of acute gastritis through network pharmacology and molecular docking

DOI: 10.12173/j.issn.1004-4337.202509028

基金项目: 潍坊护理职业学院 2025 年度青年科研基金项目 (YQJ2025013); 潍坊护理职业学院 2024 年度青年科研基金项目 (YQJ2024001)

通信作者: 张明晓, Email: zmx18223@163.com

<https://slyyx.whuzhmedj.com/>

technology. **Methods** The chemical components of CNF were obtained from the SymMap database and literature, and component targets were obtained using the Swiss Target Prediction platform. Disease targets were screened through GeneCards and OMIM database. Utilizing the STRING database in conjunction with the Cytoscape 3.8.2 software platform, we constructed a protein-protein interaction (PPI) network to identify key functional targets. The Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes pathway and Gene Ontology function annotation analysis of the core targets were performed online through the DAVID analysis tool. The "active ingredient-key target-action pathway" multi-dimensional network model was established by using Cytoscape 3.8.2 visualization software to systematically clarify the mechanism of action of the core active ingredients. Finally, molecular docking verification was performed on the core components and core targets. **Results** A total of 17 chemical components, 333 component targets and 1 239 disease targets were obtained. And 115 targets were obtained by intersection of component targets and disease targets. The PPI network was constructed using the String database and Cytoscape 3.8.2 software and the key targets were predicted, such as AKT1, TNF, IL6, etc. KEGG pathway enrichment analysis suggested that they might play a therapeutic role through the PI3K-Akt pathway, AGE-RAGE signaling pathway and so on. The key components were analyzed to be caffeic acid, sinapaldehyde, and pachypodol by "component-core target-pathway" map. Finally, the molecular docking results showed that there were strong intermolecular interactions such as hydrogen bonds and hydrophobic effects between key components and key targets, indicating high binding affinity. **Conclusion** Callicarpa Nudiflora Folium may treat acute gastritis through multi-components, multi-targets and multi-pathways, providing a scientific basis for the treatment of AG with Callicarpa Nudiflora Folium.

【Keywords】 Callicarpa Nudiflora Folium; Acute gastritis; Network pharmacology; Molecular docking; Mechanism of action

急性胃炎 (acute gastritis, AG) 是由感染、应激、药物等多种原因引起的, 以出血、水肿、糜烂为主要表现的胃黏膜急性损伤^[1]。AG 具有发病急、发病率高的特点, 由于其病情发展迅速, 若不及时处理, 严重时危及患者生命^[2]。目前西医主要采用抗感染、抑制胃酸分泌、止泻等手段, 以对症治疗为主, 但仅能暂时缓解症状, 远期容易复发, 疗效欠佳^[3-4]; 中医主张通过疏肝和胃、清热泻火、活血泻热、温经通络等手段来缓解症状, 对治疗 AG 具有一定优势^[5]。裸花紫珠属马鞭草科, 富含黄酮、挥发油、萜类等化学成分, 具有清热解毒、收敛止血之功效。其现代成药制剂裸花紫珠片、裸花紫珠栓等的说明书中明确其可用于细菌感染引起的炎症及消化道出血, 这为其用于治疗以炎症和黏膜损伤为关键病理环节的 AG 提供了初步的临床应用依据。尽管裸花紫珠临床常用相关剂型尚未直接标明胃炎适应症, 但中医理论认为其归胃经, 且临床常将其用于治疗胃热出血、胃脘痛等与 AG 相关的症候^[6]。现代药理研究也证实裸花紫珠具有显著的抗炎、抗菌和止血活性, 临床上

主要用于溃疡性结肠炎、肝炎和阴道出血等的治疗^[7-9]。另外, 刘杨研究发现裸花紫珠在改善 AG 患者疼痛、抗感染、上腹饱胀等症状方面确有效果^[10]。但目前裸花紫珠治疗 AG 的具体药效物质基础、作用靶点及信号通路网络仍未被充分阐明。本研究通过网络药理学结合分子对接技术, 多维度、多层次探讨裸花紫珠治疗 AG 的作用机制, 以期为裸花紫珠的临床应用提供有效参考。

1 方法

1.1 裸花紫珠活性成分筛选及潜在靶点预测

基于 SymMap 数据库 (<http://www.symmap.org/>) 和文献搜索裸花紫珠的化学成分。利用 Pubchem 数据库 (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) 获得化学成分的 Isomeric SMILES 信息, 并将其导入 Swiss Target Prediction 的 ADME 平台 (<http://www.swisstargetprediction.ch/>)。以 "MW ≤ 500" 且在 5 种类药性 (Lipinski、Ghose、Veber、Egan、Muegge) 的结果中满足 2 个及以上 "Yes" 为标

准, 筛选活性成分。将筛选得到的活性成分导入 Swiss Target Prediction 平台, 物种设置为“Homo sapiens”, 筛选结合概率 (probability) > 0 的相关靶点作为裸花紫珠的潜在作用靶点。

1.2 疾病靶点获取

以 AG 的英文关键词“Acute Gastritis”在 GeneCards 数据库 (<https://www.genecards.org/>) 中检索疾病靶点并筛选相关性 (Relevance) 评估大于中位数的靶点; 同时, 在 OMIM 数据库 (<https://omim.org/mimmatch/>) 检索 AG 靶点作为补充。

1.3 交集靶点获取

利用 Venny 2.1 平台 (<https://bioinfo.gp.cnb.csic.es/tools/venny/index.html>) 绘制韦恩图, 以筛选药物化学成分与疾病的交集靶点。

1.4 蛋白质互作网络图构建及核心靶点获取

将筛选得到的共有靶点提交至 STRING 数据库 (<https://string-db.org/>), 设置参数为多重蛋白分析模式 (multiple proteins), 物种限定为人类 (Homo sapiens), 并将蛋白质相互作用可信度阈值设定为 0.7, 同时剔除孤立节点。获取 TSV 格式数据后, 通过 Cytoscape 3.8.2 软件平台进行网络拓扑分析, 运用 CytoNCA 插件计算以下网络拓扑参数: 度中心性 (degree centrality, DC)、介数中心性 (betweenness centrality, BC)、接近中心性 (closeness centrality, CC)、特征向量中心性 (eigenvector centrality, EC)、网络中心性 (network centrality, NC) 及局部平均连通度 (local average connectivity, LAC)。筛选标准为各参数值高于中位数的关键靶点, 并利用该软件构建蛋白质互作 (protein-protein interaction, PPI) 网络可视化图谱。

1.5 基因本体富集分析和京都基因和基因百科全书通路分析

选取 43 个核心靶点, 利用 DAVID 数据库 (<https://david.ncifcrf.gov/>) 进行基因本体论 (Gene Ontology, GO) 富集分析和京都基因与基因组百科全书 (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes, KEGG) 富集分析, 物种选择 Homo sapiens, $P < 0.05$ 。其中 GO 分析包含 3 个子项, 分别为生物学过程 (Biological Process, BP)、细胞组分 (Cell Component, CC) 与分子功能 (Molecular Function, MF)。采用微生物信在线分

析平台 (<http://www.bioinformatics.com.cn/>) 对富集分析结果进行图形化展示。

1.6 “成分-核心靶点-通路”图构建

利用 Cytoscape 3.8.2 软件构建“成分-核心靶点-通路”网络图并进行分析。以节点表示化学成分、核心靶点和通路, 边表示节点之间的相互作用关系。

1.7 分子对接验证

基于网络药理学结果, 进一步探究核心成分与核心靶点之间的相互关系, 本研究选取度值排名前 3 的核心靶点作为受体, 度值排名前 3 的活性成分作为配体进行分子对接验证。首先进行受体分子的预处理, 在蛋白质结构数据库 PDB (<https://www.rcsb.org/>) 下载受体分子 pdb 格式的三维结构文件, 然后利用 pymol 2.4 软件删除受体的原配体, 利用 AutoDock Tools 1.5.6 软件进行去水、加氢、设置为受体操作, 保存为 pdbqt 格式。然后进行配体分子的预处理, 通过 Pubchem 数据库搜索下载化学成分 sdf 格式的三维结构文件, 用 OpenBableGUI 3.1.1 软件转换为 pdb 格式; 然后利用 AutoDock Tools 1.5.6 软件对小分子加氢、设置为配体、检测旋转键、设置旋转键一系列操作, 保存为 pdbqt 格式。最后利用 AutoDock Vina 软件对预处理后受体蛋白和配体小分子进行半柔性分子对接, 利用 Pymol 2.4 软件和 Discovery Studio 2020 软件对结果进行可视化分析。

2 结果

2.1 裸花紫珠活性成分筛选及潜在靶点预测

通过 SymMap 数据库和文献检索, 最终收集到 17 个化学成分, 将其导入 Swiss Target Prediction 平台预测靶点, 最终汇总共得到 333 个化学成分靶点, 见表 1。

2.2 疾病靶点获取

通过 GeneCards 和 OMIM 数据库检索分别获得 867 和 533 个 AG 相关靶点, 两者合并去重共得到 1 239 个疾病靶点。

2.3 交集靶点获取

通过 Venny 2.1 平台将 333 个化学成分靶点和 1 239 个疾病靶点取交集, 后共得 115 个交集靶点, 见图 1。

表1 裸花紫珠化学成分信息

Table 1. Chemical composition information of Callicarpa Nudiflora Folium

编号	英文名称	中文名称
MOL1	Caffeic acid	咖啡酸
MOL2	Hydroxytyrosol	羟基酪醇
MOL3	2,6-dimethoxy-p-benzoquinone	2,6-二甲氧基苯醌
MOL4	p-menth-8-ene-1,2-diol	对薄荷烯-8-烯-1,2-二醇
MOL5	Buergerinin G	7-环氧呋喃并[2,3-D]氧杂卓-2(3H)-酮
MOL6	(8R,9R)-isocaryolane-8,9-diol	—
MOL7	(S)-(+)-dehydrovomifoliol	去氢吐叶醇
MOL8	12-hydroxyjasmonic acid	12-羟基茉莉酸
MOL9	Oleanolic acid	齐墩果酸
MOL10	Ursolic acid	熊果酸
MOL11	Euscaphic acid	蔷薇酸
MOL12	Pachypodol	藿香黄酮醇
MOL13	Salicifoliol	—
MOL14	Murrangatin	九里香亭
MOL15	Sinapaldehyde	芥子醛
MOL16	4-hydroxy-3-methoxybenzaldehyde	香草醛
MOL17	Syringic acid	丁香酸

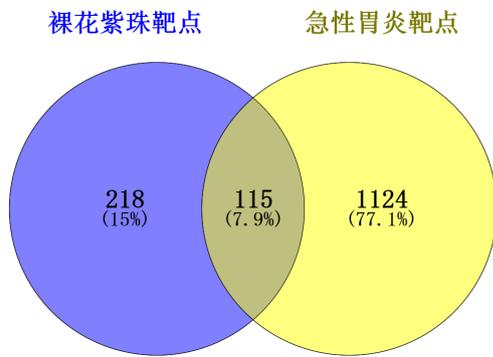


图1 裸花紫珠和急性胃炎的靶点韦恩图
Figure 1. Venn diagram of Callicarpa Nudiflora Folium and acute gastritis

2.4 PPI网络图构建及核心靶点获取

将 115 个交集靶点经过 DC、BC、CC、EC、NC、LAC 6 个指标筛选后最终获得 43 个核心靶点，同时利用 Cytoscape 3.8.2 软件绘制 PPI 网络图，筛选前网络包括 113 个节点和 1 758 条边，筛选后网络包含 43 个节点和 701 条边，见图2。图中颜色越深代表其 DC 值越大，其中 DC 排名靠前 5 的靶点是蛋白激酶 B (RAC-alpha serine/threonine-protein kinase, AKT1)、白介素 6 (interleukin-6, IL6)、肿瘤坏死因子 (tumor necrosis factor, TNF)、人表皮生长因子受体 (epidermal growth factor receptor, EGFR)、B 细

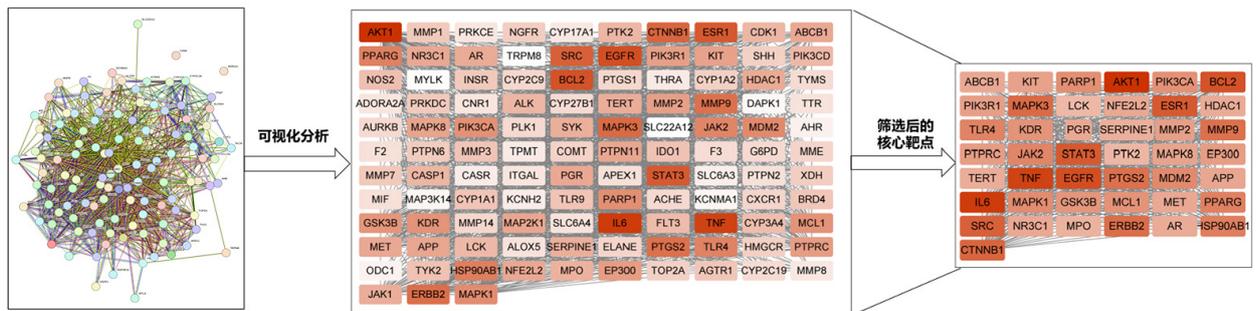


图2 靶点筛选的PPI网络图
Figure 2. Network diagram of protein-protein interaction for target screening

胞淋巴瘤因子 2 (B-cell lymphoma-2, BCL2), 表明可能是裸花紫珠治疗 AG 的核心靶点。

2.5 GO富集分析和KEGG通路富集分析

将 43 个核心靶点进行富集分析, 共涉及 443 个生物学过程、56 个细胞组分、102 个分子功能和 146 条 KEGG 通路。其中, 生物学过程主要与凋亡过程的负调控、RNA 聚合酶 II 对转录的正向调控、平滑肌细胞增殖的正向调控等有关; 细胞组分主要与质膜、含蛋白质复合物、细胞质等有关; 分子功能主要与酶结合、蛋白磷酸酶结合、蛋白酪氨酸激酶活性等有关; KEGG 主要富集于 PI3K-Akt 信号通路、AGE-RAGE 信号通路、EGFR 酪氨酸激酶抑制剂耐药性、脂质与动脉粥样硬化等。利用微生信平台对 GO 分析前 10 个条目和 KEGG 分析前 20 个

通路进行可视化呈现, 见图 3。

2.6 “成分-核心靶点-通路”图构建

利用 Cytoscape 3.8.2 软件构建“成分-核心靶点-通路”图, 共包含 72 个节点、399 条边 (图 4)。图中颜色越深、字体越大, 代表其 DC 值越大, DC 代表与该节点存在直接关系节点的数目, 反映该节点枢纽性重要性, 一般认为 DC 值越大其在网络中的调控作用就越重要。结果显示 DC 值排名靠前的 3 个成分为: 藿香黄酮醇 (MOL12, degree: 15)、咖啡酸 (MOL1, degree: 11)、芥子醛 (MOL15, degree: 11), 表明其可能是裸花紫珠治疗 AG 的核心成分。

2.7 分子对接验证

通过 PDB 数据库分别下载 AKTI (PDB

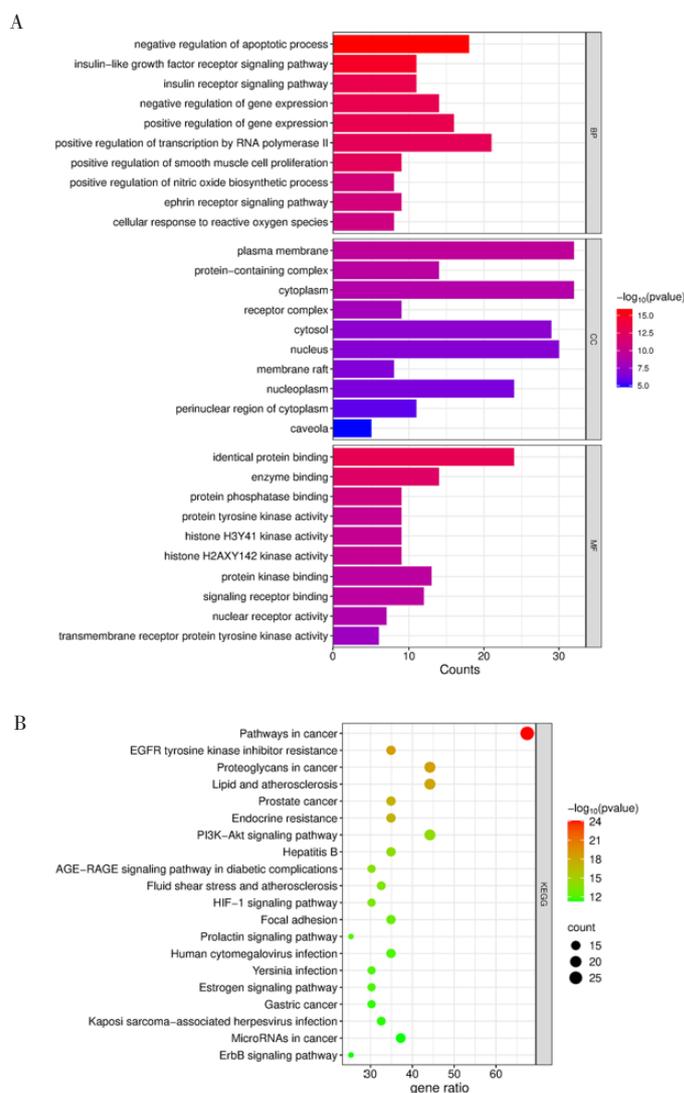


图3 GO富集分析和KEGG通路富集分析

Figure 3. Diagram of Gene Ontology enrichment analysis and Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes pathway enrichment analysis

注: A. GO富集分析图; B. KEGG通路富集分析图。

ID: 4GV1)、IL6 (PDB ID: 4CNI)、TNF (PDB ID: 5UUI) 受体蛋白的三维结构, 然后利用 AutoDock Vina 软件对预处理后受体蛋白和配体小分子进行分子对接。结合能表示受体蛋白与配体小分子之间的亲和能力, 结合能 ≤ -5 kcal/mol 可认为两者的结合能力较好。结果表明, 受体 AKTI、IL6、TNF 与配体咖啡酸、芥子醛、藿香黄酮醇两两分子对接的结合能均小于 ≤ -5 kcal/mol, 说明它们之间均有比较好的亲和力。进一步探索其相互作用关系, 选择结合能最低的前 3 组 (AKT1-藿香黄酮醇、

IL6-藿香黄酮醇、AKT1-咖啡酸) 进行分析。结果显示, 藿香黄酮醇与 AKT1 蛋白中的氨基酸残基 GLY294、ASP274 和 GLY162 产生氢键作用, 与 HIS194 和 PHE161 产生疏水作用, 与 ASP292 和 GLU191 产生静电作用; 藿香黄酮醇与 IL6 蛋白中的氨基酸残基 GLN38、GLY41、PRO40 和 GLY42 产生氢键作用, 与 VAL95 和 ALA40 产生疏水作用; 咖啡酸与 AKT1 蛋白中的氨基酸残基 ASP292 和 ALA230 形成氢键相互作用, 与 VAL164 和 ALA177 形成疏水作用, 与 MET281 形成静电作用, 见表 2 和图 5。

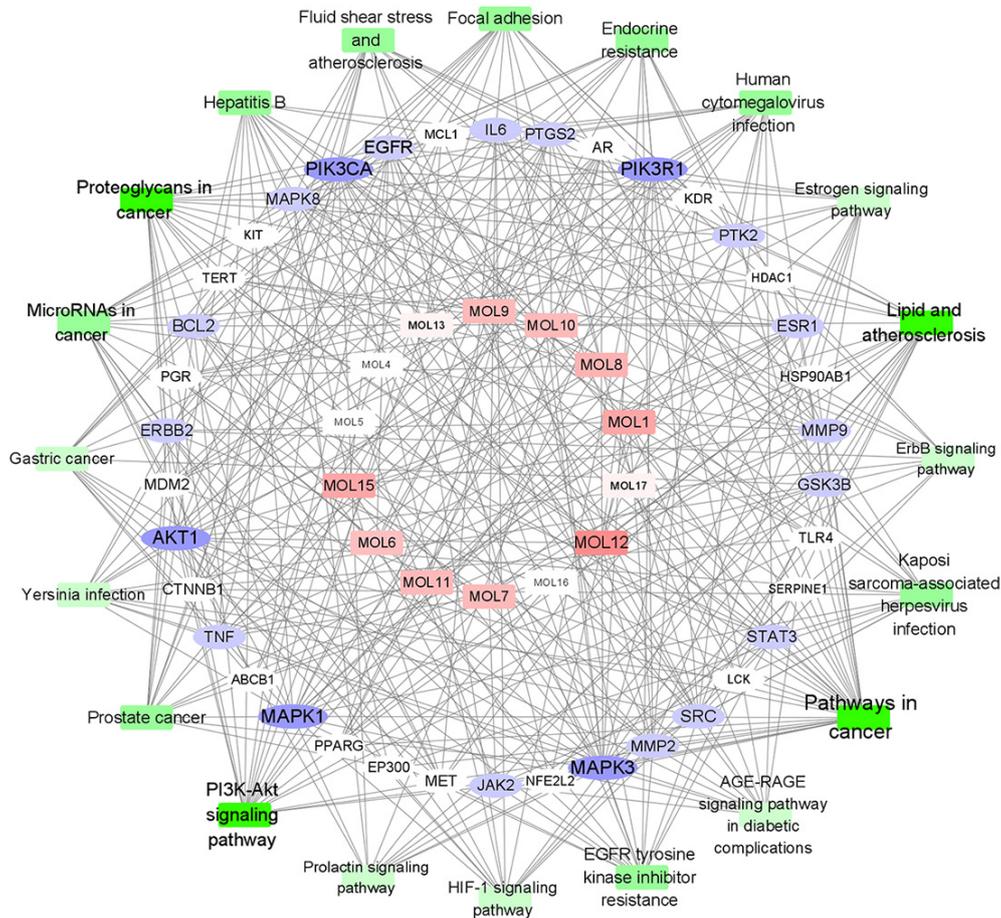


图4 “成分-核心靶点-通路”图

Figure 4. Diagram of ingredients-targets-pathways

注: 绿色代表通路; 紫色代表靶点; 红色代表化学成分。

表2 分子对接结合能 (kcal/mol)

Table 2. Molecular docking binding energy (kcal/mol)

英文名称	中文名称	AKTI	IL6	TNF
Caffeic acid	咖啡酸	-6.8	-6.3	-6.0
Sinapaldehyde	芥子醛	-5.9	-5.7	-5.4
Pachypodol	藿香黄酮醇	-8.2	-7.3	-6.3

注: AKTI. RAC-alpha serine/threonine-protein kinase, 蛋白激酶 B; IL6. Interleukin-6, 白介素 6; TNF. Tumor necrosis factor, 肿瘤坏死因子。

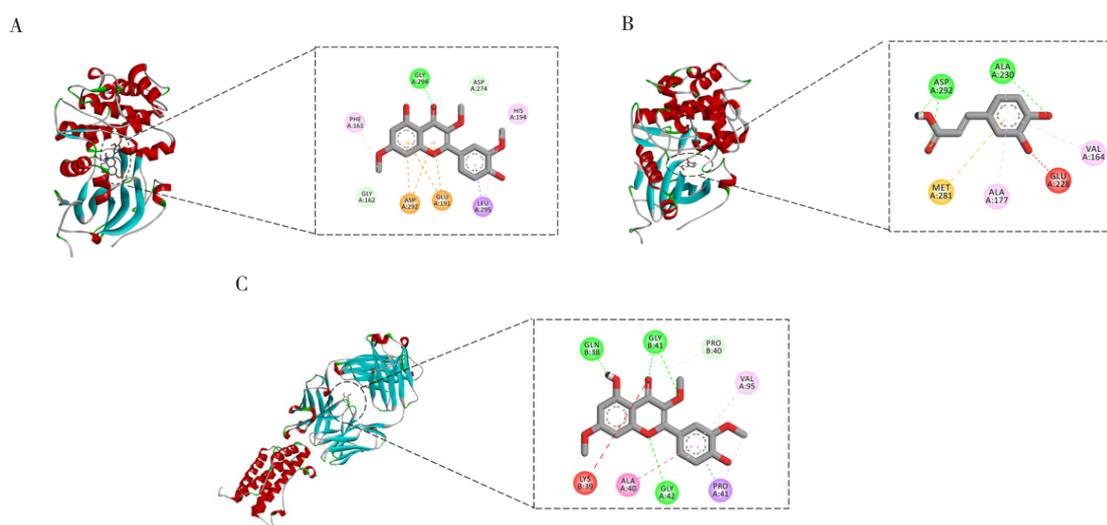


图5 分子对接结果图

Figure 5. Diagram of molecular docking results

注：A. AKT1-藜香黄酮醇的分子对接示意图；B. AKT1-咖啡酸的分子对接示意图；C. IL6-藜香黄酮醇的分子对接示意图。

3 讨论

AG 是常见的消化系统疾病，发病率高、致病因素多，其中炎症微环境和氧化应激是 AG 发展的关键因素^[11]。临床上可通过抑制炎症和氧化应激反应，调节免疫，促进胃黏膜细胞的修复，进而改善 AG 症状^[12-14]。中药裸花紫珠在民间常用于消炎止血，但其治疗 AG 的现代药理学机制尚不明确。本研究综合运用网络药理学与分子对接技术，系统揭示了裸花紫珠通过“多成分-多靶点-多通路”模式治疗 AG 的潜在机制。

本研究构建的“成分-靶点-通路”网络提示，裸花紫珠的治疗作用并非依赖于单一成分，而是由咖啡酸、芥子醛、藜香黄酮醇等核心成分协同完成。PPI 网络分析筛选出的 AKT1、TNF、IL6 等核心靶点，构成了一个紧密的相互作用网络。研究显示，咖啡酸在裸花紫珠中的含量相对较高，能通过抑制 NF- κ B 通路，减少炎症因子 TNF 和 IL6 的释放，从而减轻胃肠道的炎症反应^[15-16]；而 AKT1 是 PI3K-Akt 信号转导通路中的枢纽分子，PI3K-Akt 信号通路的激活能够有效抑制氧化应激反应，同时下调促炎因子的释放，进而显著缓解机体的炎症反应，在细胞存活、增殖和抑制凋亡中扮演着重要角色^[17-18]。这表明裸花紫珠的作用机制可能兼具“抗炎”与“保护”双重属性，一方面直接抑制 TNF、IL6 等炎症因子，另一方面通过激活 AKT1 介导的生存信号促进胃

黏膜修复。

KEGG 富集分析提示，裸花紫珠可能通过协同调控 PI3K-Akt 与 AGE-RAGE 信号通路发挥治疗 AG 的作用。裸花紫珠的有效成分可能通过抑制 AGE-RAGE 通路从源头减轻氧化损伤，同时通过调节 PI3K-Akt 通路增强胃黏膜细胞的防御和修复能力，这种对多条通路的协同调控可能是其发挥疗效的系统性基础。

本研究采用分子对接对核心成分与核心靶点之间的相互关系进行了验证。结果显示，咖啡酸、芥子醛等与 AKT1、TNF 等靶点之间均存在稳定的氢键和疏水相互作用，结合能良好，这从结构生物学的角度证实了其结合的可能性与稳定性。例如，咖啡酸与 TNF 的活性口袋残基形成多个氢键，这与文献报道的其能抑制 NF- κ B 通路从而减少 TNF 释放的结论一致^[15-16]。同样，芥子醛通过疏水作用与靶点结合，为其已知的抗氧化、降低 NO 水平的能力提供了直接的作用靶点依据^[19-20]。

综上所述，本研究通过系统的生物信息学分析，揭示了裸花紫珠主要活性成分可能通过作用于 AKT1、TNF、IL6 等关键靶点，调控 PI3K-Akt、AGE-RAGE 等多条信号通路，协同发挥抗炎、抗氧化及保护胃黏膜的作用，从而治疗 AG。这不仅为裸花紫珠的传统药用价值提供了科学依据，也为其后续的深度开发和临床应用指明了方向。

参考文献

- 吴萌, 万生芳, 王凤仪, 等. 中医药治疗急性胃炎研究进展[J]. 中医临床研究, 2015, 7(4): 140–141. [Wu M, Wan SF, Wang FY, et al. A review on treating acute gastritis in TCM medicine[J]. Clinical Journal of Chinese Medicine, 2015, 7(4): 140–141.] DOI: 10.3969/j.issn.1674-7860.2015.4.071.
- 孟宪杰. 急性胃炎综合护理效果的临床观察[J]. 中国医药指南, 2016, 14(17): 282–283. [Meng XJ. Clinical observation on the effect of comprehensive nursing for acute gastritis[J]. Guide of China Medicine, 2016, 14(17): 282–283.] DOI: CNKI:SUN:YYXK.0.2016-17-241.
- 陈立梅, 顾婷婷, 黄绪尧, 等. 香砂六君子汤合小柴胡汤加减对急性胃炎患者炎症因子和胃肠激素水平的影响[J]. 辽宁中医药大学学报, 2025, 27(7): 206–210. [Chen LM, Gu TT, Huang XY, et al. Effect of Xiangsha Liujunzi decoction combined with Xiaochaihu decoction on serum inflammatory factors and gastrointestinal hormone levels in patients with acute gastritis[J]. Journal of Liaoning University of Traditional Chinese Medicine, 2025, 27(7): 206–210.] DOI: 10.13194/j.issn.1673-842X.2025.07.035.
- 陈欣, 于秋飞, 豆江. 奥美拉唑联合莫沙必利治疗急性胃炎的效果及对不良反应的影响[J]. 名医, 2024, (3): 165–167. [Chen X, Yu QF, Dou J. Efficacy of omeprazole combined with mosapride in treating acute gastritis and its impact on adverse reactions[J]. Renowned Doctor, 2024, (3): 165–167.] DOI: 10.20255/j.cnki.issn1674-9561.2024.03.056.
- 刘长云, 吕小红. 急性胃炎临床诊断及中医药治疗研究进展[J]. 人民军医, 2019, 62(8): 774–777. [Liu CY, Lyu XH. Advances in clinical diagnosis and traditional chinese medicine treatment of acute gastritis: impact on adverse reactions[J]. People's Military Surgeon, 2019, 62(8): 774–777.] DOI: CNKI:SUN:RMJZ.0.2019-08-031.
- 康兴东, 叶阳. 裸花紫珠化学成分、药理活性及临床应用研究进展[J]. 特产研究, 2021, 43(4): 95–101. [Kang XD, Ye Y. Research progress on chemical constituents, pharmacological effects and clinical applications of callicarpa nudiflora[J]. Special Wild Economic Animal and Plant Research, 2021, 43(4): 95–101.] DOI: 10.16720/j.cnki.teyj.2021.100.
- 黄美芳, 单晨, 管向明, 等. 裸花紫珠颗粒联合布拉氏酵母菌散治疗轻中度溃疡性结肠炎的效果及机制研究[J]. 现代诊断与治疗, 2024, 35(9): 1283–1284, 1296. [Huang MF, Shan C, Guan XM, et al. Efficacy and mechanistic study of callicarpa nudiflora granules combined with saccharomyces boulardii in treating mild-to-moderate ulcerative colitis[J]. Mod Diagn Treat, 2024, 35(9): 1283–1284, 1296.] DOI: 10.20246/j.cnki.issn.1001-8174.2024.09.007.
- 李欣, 王云丽, 李娜. 裸花紫珠颗粒治疗急性乙型肝炎临床观察[J]. 中国卫生标准管理, 2018, 9(8): 100–103. [Li X, Wang YL, Li N. Clinical observation of Luohuazizhu particles on patients with acute hepatitis B[J]. China Health Standard Management, 2018, 9(8): 100–103.] DOI: 10.3969/j.issn.1674-9316.2018.08.051.
- 黄艳华. 妇炎康胶囊联合裸花紫珠胶囊治疗阴道出血的效果分析[J]. 现代诊断与治疗, 2024, 35(5): 651–652, 655. [Huang YH. Efficacy analysis of fuyankang capsules combined with callicarpa nudiflora capsules in treating vaginal bleeding[J]. Modern Diagnosis & Treatment, 2024, 35(5): 651–652, 655.] DOI: 10.20246/j.cnki.issn.1001-8174.2024.05.007.
- 刘杨. 裸花紫珠颗粒治疗急性胃炎的随机临床对照研究[D]. 辽宁中医药大学, 2023. [Liu Y. Randomized controlled trial of callicarpa nudiflora granules in the treatment of acute gastritis[D]. Liaoning University of Traditional Chinese Medicine, 2023.] DOI: 10.27213/d.cnki.glnzc.2023.000353.
- 杨欣雨, 胡梦情, 罗雪, 等. 霍山石斛鲜、干品对急性胃炎模型大鼠作用的差异研究[J]. 中草药, 2025, 56(17): 6242–6251. [Yang XY, Hu MQ, XUE L, et al. Comparative study on effects of fresh and dried dendrobium huoshanense on acute gastritis model rats[J]. Chinese Traditional and Herbal Drugs, 2025, 56(17): 6242–6251.] DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2025.17.014.
- 宋雅雅, 龙春林, 陈玮哲, 等. 民间饮料植物红芽木叶抗急性肠胃炎作用机制研究[J]. 中南民族大学学报(自然科学版), 2025, 44(6): 817–825. [Song YY, Long CL, Chen WZ, et al. Cratoxylum formosum ssp. pruniflorum alleviates inflammatory response by ROS production and PI3K-Akt signaling pathway[J]. Journal of South-Central University for Nationalities (Natural Science Edition), 2025, 44(6): 817–825.] DOI: 10.20056/j.cnki.ZNMDZK.20250820.
- 金宝宇, 杨斌, 王存萍, 等. 基于网络药理学及实验验证探究草果挥发油改善急性胃炎的作用机制[J]. 西南民族大学学报(自然科学版), 2022, 48(6): 643–652. [Jin BY, Yang B, Wang CP, et al. Mechanism of volatile oil of amomum tsao-ko crevost et lemaire in the treatment of acute gastritis based on network pharmacology and experimental validation[J]. Journal of Southwest University for Nationalities(Natural Science Edition), 2022, 48(6): 643–652.] DOI: 10.11920/xnmzdk.2022.06.008.
- 吴昊. 砂连和胃胶囊质量标准提升及治疗急性胃炎的作用机制研究[D]. 北京中医药大学, 2022. [Wu H. Study on the quality standard enhancement of shalian hewei capsule and its mechanism of action in treating acute gastritis[D]. Beijing University of Chinese Medicine, 2022.] DOI: 10.26973/d.cnki.gbjzu.2022.000943.
- 鲁明. NF- κ B/IL-6/STAT-3 通路在咖啡酸抑制肝癌炎症微环境中的作用及机制研究[D]. 南京医科大学, 2017. [Lu M. The role and mechanism of NF- κ B/IL-6/STAT-3 pathway in caffeic acid-inhibited inflammatory microenvironment in hepatocellular carcinoma[D]. Nanjing Medical University, 2017.] DOI: 10.27249/d.cnki.gnjyu.2017.000203.
- 陈娟, 胡虹, 施悦, 等. 高效液相色谱法同时测定海南裸花紫珠中 6 种抗炎活性成分的含量与质量评价[J]. 药理学学报, 2024, 59(5): 1408–1421. [Chen J, Hu H, Shi Y, et al. Quality evaluation of callicarpa nudiflora from Hainan Province based on simultaneous determination of six anti-inflammatory active components by HPLC[J]. Acta Pharmaceutica Sinica, 2024, 59(5): 1408–1421.] DOI: 10.16438/j.0513-4870.2023-1382.
- 张元浩, 常占杰, 席奇, 等. 中药调控 PI3K/AKT 通路防治急性肝损伤[J]. 中医学报, 1–11. [2026-02-05]. [Zhang YH,

- Chang ZJ, Xi Q, et al. Traditional Chinese medicine regulates the PI3K/AKT pathway for the prevention and treatment of acute liver injury[J]. Acta Chinese Medicine, 1–11. [2026–02–05.] <https://link.cnki.net/urlid/41.1411.R.20250226.1505.003>
- 18 王小玉, 孔佑虔, 李泽光. 中药单体调控 PI3K/Akt 信号通路干预类风湿关节炎的研究进展[J]. 中国医药导报, 2024, 21(18): 192–194. [Wang XY, Kong YQ, Li ZG. Research progress of Chinese medicine monomers modulating PI3K/Akt signaling pathway to intervene in rheumatoid arthritis[J]. China Medical Herald, 2024, 21(18): 192–194.] DOI: 10.20047/j.issn1673–7210.2024.18.50.
- 19 李月婷. 牡荆子的化学成分及其体内过程研究[D]. 北京中医药大学, 2017. [Li YT. Studies on chemical constituents of fruits of *Vitex negundo* var. *cannabifolia* and their metabolism in rats[D]. Beijing University of Chinese Medicine, 2017.] https://kns.cnki.net/kcms2/article/abstract?v=hmNf6PfaBuEUWZ6Rhw5ltBD-kkhTgaeIjv2D2jdA-Kkl_Yiw4azxpqwvEEcwZsC3kAK6r2zEhEguxQNbeZQVCq17Y7zay6FOQTcZhA2Mt_F2BF0ez5Gz8EAAsoyTW4zSONm6NBQkXepOWik48_cVdUW2q0b_o1kQBaitBOue_JvMIZFPip-asWVZ2jeqVN&uniplatform=NZKPT&language=CHS
- 20 黄修解, 蒙定水. 胃萎康合剂对实验大鼠萎缩性胃炎 SOD, MDA 和 NO 的影响[J]. 广西中医学院学报, 2006, (3): 5–7. [Huang XJ, Meng DS. Effects of Weiweikang Mixture (WVKM) on SOD MDA and NO: Cases of rats with Chronic Atrophic Gastritis (CAG)[J]. Journal of Guangxi University of Chinese, 2006, (3): 5–7.] https://kns.cnki.net/kcms2/article/abstract?v=hmNf6PfaBswUUz2cxUU-KxJ-LiF1sa3w-fBUyKGHbGTETTnbegxz3pXBysiZ85ZvyS-xDg8qbFo-TleCyBLDPVf6p9lqjPbUFnvJMdyD6gB7nGOVCorKOKoYE8ANRX3L9NS5aLPNLyTQfxYbnub2fRdB57SJBcYPrZKdad1cYOk9DK_erUHVA==&uniplatform=NZKPT&language=CHS

收稿日期: 2025 年 09 月 12 日 修回日期: 2025 年 12 月 28 日

本文编辑: 沈力 黄笛

引用本文: 张明晓, 刘凤祺, 丁兴华, 等. 基于网络药理学和分子对接技术探究裸花紫珠治疗急性胃炎的作用机制[J]. 数理医药学杂志, 2026, 39(3): 191–199. DOI: 10.12173/j.issn.1004–4337.202509028.
Zhang MX, Liu FQ, Ding XH, et al. The mechanism of *Callicarpa Nudiflora* Folium in the treatment of acute gastritis based on network pharmacology and molecular docking technology[J]. Journal of Mathematical Medicine, 2026, 39(3): 191–199. DOI: 10.12173/j.issn.1004–4337.202509028.