

# 基于网络药理学探讨马鞭草治疗肝癌的作用机制

余安徽

开阳县人民医院药剂科, 贵州 贵阳 550300

**摘要:** 网络药理学属于系统生物学前沿理论, 它对于生物系统网络的研究深入准确, 能够专门选取特定的信号节点来展开多靶向药物分子设计, 探讨药物作用机制。所以说, 网络药理学对于信号通路的调节研究途径相当丰富, 在提高药物治疗效果并降低毒副作用方面表现出色。本文中主要基于网络药理学来探讨马鞭草治疗肝癌相关作用机制, 展开人体体内实验验证操作, 分析讨论研究实验结果。

**关键词:** 网络药理学; 马鞭草; 肝癌治疗; 作用机制; 人体体内实验; 结果

## Discussion on the Mechanism of Verbena in the Treatment of Liver Cancer Based on Network Pharmacology

Yu, Anhui

Pharmacy Department of Kaiyang County People's Hospital, Kaiyang County, Guiyang, Guizhou, 550300, China

**Abstract:** Network pharmacology belongs to the frontier theory of systems biology. It studies the network of biological systems deeply and accurately, and can select specific signal nodes to design multi-targeted drug molecules and explore the mechanism of drug action. Therefore, network pharmacology has a rich research approach to the regulation of signal pathways, and it is excellent in improving the therapeutic effect of drugs and reducing the side effects. In this paper, based on network pharmacology, we will discuss the mechanism of verbena in the treatment of liver cancer, carry out experiments in human body, and analyze and discuss the experimental results.

**Keywords:** Network pharmacology; Verbena; Treatment of liver cancer; Mechanism of action; Experiments in human body; Result

DOI: 10.62639/sspis56.20240104

### 前言

网络药理学所构建的大数据平台能够从多个层面阐释中药复方的作用机制, 即在确定药物与疾病的共同靶点基础上, 通过网络药理学中的大量富集分析、人体体内实验来验证中药治疗疾病效果。目前, 基于网络药理学技术来讨论中药——马鞭草治疗肝癌的作用机制已经相当成熟, 内容比较全面, 为进一步研究该中药的抗癌作用提供了技术性参考。

### 一、网络药理学的应用

#### (一) 建立网络药理学数据库与软件

网络药理学需要建立独立的数据库, 以丰富软件内容应用, 这就为科学分析患者所使用中药的抗癌成分以及靶点筛选创造了条件。就目前的中药系统药理学数据库检索应用功能而言, 主要研究生物用药口服的利用度 OB 以及药物相似性 DL, 前者  $OB \geq 30\%$ , 后者  $DL \geq 2.0$ , 主要对中药成分进行了细致筛选, 将各种数据库筛选成分靶点再融入到数据库中<sup>[1]</sup>。网络药理学强调对信号通路的多途径调节, 提高药物的治疗效果, 降低毒副作用, 从而提高新药临床试验的成功率, 节省药物的研发费用。

#### (二) 收集癌症靶点的药物靶点

就以肝癌为例, 运用网络药理学来收集肝癌癌症靶点, 并形成药物靶点预测机制是相当重要的。例如, 可以在网络药理学 GeneCards、OMIM 等数据库中分析检索关键词, 如“Liver cancer”来获取肝癌癌症靶点, 通过数据库靶点处理分析来构建肝癌癌症靶点数据集。在数据集中, 再形成药物靶点, 为随后构建中药复方网络创造前提基础。在对癌症靶点进行处理过程中, 也需要分析药物调控网络图, 结合靶点来分析肝癌癌症靶点与药物靶点之间的关联关系。

#### (三) 形成网络药理学关系图

要在网络药理学相关网站上构建完整的 PPI 网络, 并相应设置网络参数, 去除游离于网络中的某些无连接节点。就 PPI 网络构建过程而言, 需要充分利用节点大小以及颜色深浅变化来表示 Degree 值大小, 客观反映某些组合分数大小。同时, 利用插件来对肝癌癌症靶点进行聚类分析也是很有必要的, 如此是为了建立肝癌抗癌治疗的核心作用靶点, 完成靶点通路的富集分析过程。大体来讲, 要借助通路富集处理来筛选靶点条件, 进行关键的靶点功能富集分析, 最后筛选设计出通路图。

在网络药理学作用下, 建立分子对接机制也

(稿件编号: IS-24-4-1004)

作者简介: 余安徽 (1985-09), 性别: 女, 汉族, 贵州省贵阳市, 大学本科, 主管中药师, 研究方向: 中药学。

很有必要, 主要是为了彰显核心靶点, 确保在数据库中获取癌症的靶点结构, 同时形成靶点形式。主要运用软件去水处理来对接形成可视化处理结果<sup>[2]</sup>。

## 二、基于网络药理学的马鞭草治疗肝癌作用机制形成实验过程研讨

在应用网络药理学基础上, 需要对马鞭草治疗肝癌的作用机制展开研讨分析, 得出研究结果。下文结合多点来谈:

### (一) 选取材料

要参考人体肝癌的癌细胞扩散情况来选取实验用材料, 其中专门选择了马鞭草配合网络药理学展开研究。在研究内容上, 主要基于研究过程来细致分析提出更多研究内容<sup>[3]</sup>。

### (二) 实验给药

在实验给药环节, 要创建动物模型来完成给药操作过程。所选择的实验研究对象是小白鼠, 将小白鼠随机分为模型组以及常规组, 每组有5只小白鼠, 收获它们体内所生长的人体肝癌细胞, 配合PBS细胞悬液浓度来调整数值指标, 对每一只小白鼠进行皮下注射细胞悬液, 同时根据人鼠的药物剂量换算公式来计算出小白鼠的每日准确给药剂量。例如, 每一组小白鼠每日按照 $21.5\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ 来进行灌胃处理, 同时在模型组每日进行相同剂量的生理盐水灌胃操作, 然后测量小白鼠的肝癌肿瘤长宽变化, 计算肿瘤体积, 最后绘制生成小白鼠的肝癌肿瘤生长曲线。在第20天, 为小白鼠吸入麻醉, 麻醉处理后小白鼠皮下肿瘤组织位置进行进一步观察检测。

在取出小白鼠体内肿瘤组织后, 需要采用浓度为4%的多聚甲醛固定组织进行长达48小时的处理。同时, 要在切片以后进行肿瘤染色、封片、最后在显微镜下观察小白鼠的肝癌肿瘤组织病理学变化情况<sup>[4]</sup>。

## 三、基于网络药理学的马鞭草治疗肝癌作用机制形成实验结果研讨

基于网络药理学对马鞭草治疗肝癌作用机制的形成进行实验分析, 其所得到的实验结果, 为此下文主要分析6点:

### (一) 靶点筛选结果

需要结合网络药理学以及实验研究结果来分析靶点筛选结果, 了解马鞭草治疗肝癌的相关作用机制, 形成最终实验结果。在数据库中, 需要了解到马鞭草在治疗肝癌过程中作用获得超过150个肝癌活性化合物, 主要通过该SwissTarget数据库检索来获得马鞭草诸多药物成分八点, 同时删去大量带有重复值的无用八点, 最终留下关键靶点筛选结果。

### (二) 马鞭草活性成分与肝癌疾病关系构建

要利用网络药理学来分析马鞭草的活性成分, 建立中药药物本身与肝癌疾病之间的关系网络, 获得超过600个交集靶点。在这些靶点中,

主要对马鞭草的活性成分以及靶点节点化合物内容进行分析, 主要是对马鞭草中药中的活性成分进行分析, 形成肝癌疾病靶点网络图, 计算获得相关节点度值。就马鞭草而言, 需要考察它的中药成分变化, 了解其中化合物所发挥的治疗作用, 如此才能构建马鞭草的活性成分, 了解它与肝癌疾病之间的关联关系。在建立马鞭草药物靶点过程中, 结合药物可能的作用效果来分析网络药理学数据库内容也是很有必要的。这是因为数据库中药物靶点、疾病靶点较多, 删除其中不必要的靶点对于精简临床治疗过程, 提高治疗工作效率都大有帮助。所以说, 针对马鞭草的活性成分关键靶点分析必须深入到位, 主要基于靶点关键内容来建立分析机制, 确保研究到位, 形成不同活性成分之间的相互连接, 改良药物治疗效果<sup>[5]</sup>。

### (三) PPI 蛋白数据分析网络构建

要在网络药理学基础上构建PPI蛋白数据, 分析数据库中蛋白数据的互作作用。在分析Degree值过程中, 也需要结合数值大小与颜色深浅变化, 充分利用各种插件展开分析, 了解马鞭草中药药物中的关键蛋白链变化情况, 结合筛选条件来分析核心基因网络运作与变化情况。如此操作, 就能构建完整的PPI蛋白数据分析网络。例如, 系统分析大量蛋白在生物系统中的相互作用关系, 对了解生物系统中蛋白质的工作原理, 了解疾病等特殊生理状态下生物信号和能量物质代谢的反应机制。

### (四) 通路富集分析

在分析网络药理学实验中的通路富集情况时, 需要对肝癌癌症中的癌细胞以及马鞭草中药作用进行分析, 了解基因表达正向调控情况, 了解细胞增殖正调节、转录变化, 分析其中的生物过程关联关系。在对分子功能中的ATP结合情况进行分析过程中, 就能了解马鞭草对于肝癌治疗所产生的作用机制, 思考其中通路富集分析变化情况。一般来说, 需要参考马鞭草重要、肝癌肿瘤病毒感染, 了解PPI蛋白互作情况, 选择能够实现对接预测的关键蛋白内容<sup>[6]</sup>。

### (五) 对接分子机制

要围绕马鞭草来分析其在网络药理学中的对接分子机制, 形成关键的蛋白分子化合物有效结合机制, 确保诸多肝癌癌症靶点能够与马鞭草药物靶点形成有效结合, 深挖其中的某些健肝药物活性成分。结合较好结合能力以及稳定性来对分子对接结果进行优化, 说明马鞭草的药效发挥作用会对马鞭草治疗肝癌产生重要影响。在结合作机制建立理论参考基础上, 还需要做好动物实验<sup>[7]</sup>。

### (六) 动物实验分析

在最终的动物实验环节中, 主要针对肝癌细胞的肿瘤质量明显降低情况进行分析, 保证肿瘤体积能够明显减小。在通过网络药理学处理后, 就实现了模型组与对照组的相互对比, 保证原位移植肿瘤的蛋白表现平稳。如果肿瘤蛋白表现明显下降, 则需要结合染色体在显微镜中变化来分

析马鞭草中药用药剂量的变化, 确保细胞形态完整化。在这一过程中, 需要保证细胞核明显增大, 同时明显调整核仁, 如果血管较多, 则需要做好肝板有效排列工作, 避免出现肝板排列紊乱情况<sup>[8]</sup>。

#### 四、基于网络药理学的马鞭草治疗肝癌作用机制形成实验结论总结

在本文中主要研究了网络药理学以及马鞭草重要, 它们能够联合治疗肝癌, 形成治疗作用机制, 通过实验结果来证明所形成作用机制的有效价值。从某种程度来讲, 要通过马鞭草中的某种活性成分来分析其中中药含量较高问题, 它能够有效抑制其中药物活性成分产生相互作用, 形成其中活性成分<sup>[9]</sup>。

在分析KEGG富集成分过程中, 也需要结合信号通路图谱来分析肝癌抗癌治疗过程, 了解肝癌癌瘤表皮生长是受到因子受体影响的, 主要通过促进激活PI3K信号来形成相应传导机制。如此一来, 对于肝癌肿瘤细胞的扩散效果抑制帮助较大, 主要通过富集信号通路来治疗肝癌, 同时发挥马鞭草作用机制, 这也是治疗疾病的关键所在<sup>[10]</sup>。

在分子对接方面, 则主要结合对接结果来显示关键化合物中如马鞭草中药药物的靶点匹配度。在本文中, 就通过动物实验来探索并初步证明了马鞭草的中药药效作用。换言之, 就是在PPI蛋白相互作用以及KEGG通路富集过程与结果中来分析影响肝癌癌瘤发生发展的具体要素, 如此对于从生物学功能方面解析如何治疗该疾病大有帮助。因为从影响肝癌的生物学功能层面来看, 马鞭草中的成分在肝癌治疗研究方面非常深入, 它主要通过验证临床治疗情况来建立基于网络药理学的信号通路, 如此对于影响肝癌的发生发展进程而言大有帮助<sup>[11]</sup>。所以说, 要可重现的一站式计算平台, 全方位覆盖大分子生物药设计、小分子化合物设计、分子模拟、数据分析等应用场景。

#### 五、总结

综上所述, 本文主要基于网络药理学来分析马鞭草中药药物在治疗肝癌过程中所形成的作用机制。它主要本着科学合理、“扶正抗癌”的治疗原则来展开治疗过程, 大量收集和筛选药物靶点以及癌瘤靶点, 建立靶点之间基于药效成果的富集信号通路。在这一富集信号中, 主要基于现代化科技进步内容来分析网络药理学内容, 形成大平台数据库, 同时也利用各种数据库中的生物信息科技指标来分析马鞭草作为中药复方的现代化治疗应用成果。所以说, 基于网络药理学的马鞭草中药药物在形成肝癌治疗作用机制上起到了重要作用, 非常值得进一步研究和推广应用。

#### 参考文献:

- [1] 蔡孟成, 金永生. 基于网络药理学对马鞭草-青蒿干预新型冠状病毒肺炎的物质基础与作用机制研究[J]. 解放军医药杂志, 2020, 32(10):6-11.
- [2] 黄敬文, 安丽凤, 韩雪, 等. 基于网络药理学研究疏风解毒胶囊防治新型冠状病毒肺炎的潜在作用机制[J]. 海南医学院学报, 2020, 26(11):814-819.
- [3] 曹灿, 崔瑛, 楚玉玺, 等. 基于网络药理学与分子对接方法的疏风解毒胶囊治疗新型冠状病毒肺炎(COVID-19)的作用机制与活性成分研究[J]. 中草药, 2020, 51(9):2283-2296.
- [4] 于兰, 张选明, 陈韩英, 等. 新型冠状病毒肺炎(COVID-19)防治中药复方网络药理学评价[J]. 中药材, 2021, 44(4):1031-1038.
- [5] 柳卓, 谭小宁, 蔚慧颖, 等. 基于网络药理学和生物信息学探讨并验证槲皮素治疗肝癌的靶点和机制[J]. 中国中医基础医学杂志, 2023, 29(11):1904-1911.
- [6] 吴波, 陈醒, 易剑峰, 等. 基于生物信息学和网络药理学的千里光调控肝癌的分子机制研究[J]. 临床肿瘤学杂志, 2023, 28(3):241-248.
- [7] 马梦情, 孙嘉玲, 胡锐, 等. 基于网络药理学和分子对接探讨芪术抗癌方治疗原发性肝癌的分子机制[J]. 中国药理学通报, 2023, 39(12):2369-2377.
- [8] 任妍慧, 秦园媛, 常福厚, 等. 基于网络药理学和分子对接探讨山沉香对肝癌的作用机制[J]. 中国药理学与毒理学杂志, 2023, 37(z1):30.
- [9] 邹强, 李丹琦, 刘学贵, 等. 紫花苜蓿中黄酮类化合物抗肝癌的网络药理学研究[J]. 中南药学, 2023, 21(3):685-691.
- [10] 陈维佳, 周明艳, 胡继成, 等. 胆木抗肝癌活性的网络药理学及初步细胞筛选研究[J]. 海南医学院学报, 2023, 29(12):881-889, 898.
- [11] 杨宝乐, 王小娟, 张书瑜, 等. 基于网络药理学探讨三七治疗肝癌的作用机制[J]. 转化医学杂志, 2023, 12(4):149-154, 163.