

# 基于网络药理学及分子对接探讨蒙药清咽六味散治疗 急性咽炎的“活性成分—核心靶点—通路”机制

吴哈达<sup>1</sup>, 斯琴图雅<sup>2</sup>, 金媛媛<sup>2</sup>, 呼思乐<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>内蒙古自治区国际蒙医医院 内蒙古呼和浩特

<sup>2</sup>内蒙古医科大学 内蒙古呼和浩特

**【摘要】目的** 旨在运用网络药理学和分子对接技术, 深入探究蒙药经典方剂清咽六味散(QYLWS)在治疗急性咽炎中的药效物质基础及其作用机制。**方法** 利用传统中药系统药理学数据库(TCMSP)及文献资料, 筛选出QYLWS中的主要有效活性成分及其作用靶点; 通过GeneCards和OMIM数据库收集急性咽炎相关的疾病靶点, 并运用Venny 2.1工具确定药物与疾病的共有靶点; 利用STRING数据库进行蛋白质相互作用分析, 构建PPI网络, 并进行拓扑分析以识别关键靶点。同时, 使用Cytoscape 3.10.3软件构建药物—活性成分—靶点网络; 采用DAVID数据库对共有靶点进行GO(Gene Ontology)和KEGG(Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes)富集分析, 以揭示QYLWS在治疗急性咽炎过程中的生物学过程、分子功能、细胞组分及KEGG信号通路, 并通过AutoDockTools软件进行分子对接验证。**结果** 筛选出QYLWS治疗急性咽炎的槲皮素、柚皮素、苯海拉明等3个核心成分, 核心靶点AKT1、IL6、TP53、TNF、CASP3等10个, 关键通路涉及癌症途径、脂质与动脉粥样硬化、PI3K-Akt信号通路等20个。分子对接结果亦证实, 关键靶点蛋白与核心活性成分之间具有良好的结合活性。**结论** 本研究初步阐明了QYLWS通过多成分、多靶点、多通路的复杂机制发挥其抗感染治疗作用, 为QYLWS的临床应用及深入研究提供了坚实的科学依据。

**【关键词】** 急性咽炎; 清咽六味散; 网络药理学; 药效物质; 作用机制

**【基金项目】** 内蒙古自治区蒙医药协同创新中心科学研究项目(MYYXTPY202209): 利用传统蒙药研制润喉糖

**【收稿日期】** 2026年3月17日

**【出刊日期】** 2026年4月25日

**【DOI】** 10.12208/j.ijcr.20260175

## Exploring the “active ingredient core target pathway” mechanism of Mongolian medicine Qingyan Liuwei San in the treatment of acute pharyngitis based on network pharmacology and molecular docking

Hada Wu<sup>1</sup>, Siqin Tuya<sup>2</sup>, Yuanyuan Jin<sup>2</sup>, Sile Hu<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Inner Mongolia Autonomous Region International Mongolian Hospital, Hohhot, Inner Mongolia

<sup>2</sup>Inner Mongolia Medical University, Hohhot, Inner Mongolia

**【Abstract】 Objective** To explore the pharmacological substance basis and mechanism of action of the classic Mongolian medicine formula Qingyan Liuwei San in the treatment of acute pharyngitis using network pharmacology and molecular docking technology. **Methods** Using the Traditional Chinese Medicine Systems Pharmacology Database (TCMSP) and literature data, the main active ingredients and their targets in Qingyan Liuwei San were screened; Collect disease targets related to acute pharyngitis through GeneCards and OMIM databases, and use Venny 2.1 tool to identify common targets between drugs and diseases; Using STRING database for protein interaction analysis, constructing PPI network, and conducting topological analysis to identify key targets. Meanwhile, Cytoscape 3.10.3 software was used to construct a drug active ingredient target network; Using the DAVID database, GO(Gene Ontology) and KEGG(Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) enrichment analysis were performed on common targets to reveal the biological

第一作者简介: 吴哈达, 博士, 内蒙古自治区国际蒙医医院消化内科主任医师, 研究方向: 蒙医药诊治消化道及咽喉疾病;

\*通讯作者: 呼思乐, 内蒙古自治区国际蒙医医院研究生, 研究方向: 蒙医药诊治消化道及咽喉疾病。

processes, molecular functions, cellular components, and KEGG signaling pathways of Qingyan Liuwei San in the treatment of acute pharyngitis. Molecular docking validation was performed using AutoDockTools software. **Results** Three core components, including quercetin, naringenin and diphenhydramine, were screened out from Qingyan Liuwei Powder for the treatment of acute pharyngitis, 10 core targets, including AKT1, IL6, TP53, TNF and CASP3, and 20 key pathways, including cancer pathway, lipid and atherosclerosis, and PI3K Akt signaling pathway. The molecular docking results also confirmed that there is good binding activity between the key target protein and the core active ingredient. **Conclusion** This study preliminarily elucidated the anti-inflammatory therapeutic effect of Qingyan Liuwei San through a complex mechanism of multiple components, targets, and pathways, providing a solid scientific basis for the clinical application and in-depth research of Qingyan Liuwei San.

**【 Keywords 】** Acute pharyngitis; Qingyan Liuwei San; Network pharmacology; Pharmacological substance; Mechanism of action

急性咽炎 (Acute pharyngitis, AP) 是耳鼻咽喉科常见的呼吸道感染性疾病, 其炎症反应主要局限于淋巴组织、黏膜及黏膜下组织。该病多由细菌或病毒感染引发, 常见诱因包括受凉、过度劳累、饮酒、吸烟及免疫力下降, 且好发于冬春两季<sup>[1]</sup>。患者主要表现为发热、咽痛, 病毒性感染常伴随咳嗽、腹泻等症状, 而细菌性感染则可能引发寒战、吞咽困难等。在发达国家, 咽炎病例约占门诊总量的 22.6%-26.1%, 其中约 75% 由病毒引起<sup>[2]</sup>, 腺病毒是最常见的病原体之一。化脓性链球菌 (A 组  $\beta$  溶血性链球菌) 是细菌性感染的主要病原体, 在儿童和成人咽炎病例中分别占 20%-30% 和 5%-15%<sup>[3]</sup>。近年来, 蒙医药在急性咽炎治疗领域展现出显著疗效, 因其应用广泛且副作用较少而备受关注<sup>[4]</sup>, 但其作用机制研究尚待深入。

蒙医学将急性咽炎归为“咽喉病”, 认为其由血热、希拉热过盛及赫依失衡导致体内三根失调而引发, 特征性表现为咽部红肿疼痛<sup>[5]</sup>。蒙药经典方剂清咽六味散 (QYLWS) 又称立西-6, 收录于《医法海鉴》及《中华人民共和国卫生部药品标准》蒙药分册, 由丁香、石膏、甘草、木香、诃子及玉簪花组成, 具有清咽利肺之功效, 主治外感咳嗽、声音嘶哑、咽喉肿痛等症<sup>[6]</sup>。现代药理学研究表明, 该方剂兼具抗炎、镇痛等作用: 其抗炎机制与抑制 COX-2 活性、拮抗 PGE2 及组胺等炎症介质相关, 并能降低 IL-1 $\alpha$ 、IL-6、IL-1 $\beta$  等促炎因子水平, 同时提升抗炎因子 IL-10 含量<sup>[7]</sup>。然而, QYLWS 的作用机理及组方原理研究仍属空白。本研究拟运用网络药理学结合分子对接技术, 系统解析 QYLWS 治疗急性咽炎的药效物质基础、关键作用靶点及潜在治疗机制。

## 1 资料与方法

### 1.1 QYLWS 的有效活性成分及其作用靶点预测

采用 TCMSP 数据库 (<https://tcmsp-e.com>) 搜集 QYLWS 六味药材的活性成分, 筛选 OB $\geq$ 30%、DL $\geq$ 0.18 的成分及其靶点, 查阅相关文献, 补充部分活性成分及其靶点信息, 利用 Uniprot 数据库 (<http://www.uniprot.org>) 校正靶点名称, 利用 Cytoscape 3.10.3 软件构建药物-活性成分-靶点网络, 以节点度值评估网络。

#### 1.2 急性咽炎靶点信息搜集

在 GeneCards (<https://www.genecards.org>) 和 OMIM 数据库 (<https://omim.org>) 中检索 “Acute pharyngitis” 关键词, 汇总并去重疾病靶点数据。

#### 1.3 交集靶点蛋白质网络构建

使用 Venny 2.1 (<https://bioinfogp.cnb.csic.es/tools/venny/index.html>) 绘制韦恩图筛选共同靶点, 导入 STRING 数据库 (<https://string-db.org>) (置信度阈值 $>0.4$ ) 筛选互动关系, 使用 Cytoscape 3.10.3 软件构建 PPI 网络, 计算拓扑特性, 确定前 10 核心靶点。

#### 1.4 生物学机制富集分析

通过 DAVID 6.8 数据库 (<https://david.ncifcrf.gov>) 进行 GO 和 KEGG 富集分析 (FDR $<0.05$ ), 分析 QYLWS 治疗急性咽炎的信号传导途径。

#### 1.5 药物-靶点-通路-疾病网络构建

借助 Cytoscape 3.10.3 软件构建 “药物-靶点-通路-疾病” 网络模型。

#### 1.6 分子对接验证

借助 Pubchem 数据库 (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) 下载配体三维结构, 从 PDB 数据库 (<https://www.rcsb.org/pdb>) 获取蛋白受体的三维结构, 使用 Pymol 处理蛋白结构, 通过 AutoDockTools 软件添加氢原子, 用 Open Babel GUI 转换文件格式, 保存活性口袋数据, 执行分子对接 (AutoDockTools), 用 Pymol 可视化对接结果。

## 2 结果

### 2.1 QYLWS 主要活性成分及其作用靶点

在 TCMSP、BATMAN-TCM 等数据库中未查询到石膏成分,所以,QYLWS 中的石膏因无靶点数据未纳入。其余 5 种单体通过 TCMSP 数据库及文献检索系统筛选、合并去重及无靶点成分剔除后,最终获得 112 个化学成分及 409 个药物作用靶点。代表性活性成分,见表 1。其中:丁香、甘草、玉簪花共有的成分:山柰酚(kaempferol,A1)、槲皮素(quercetin,A2);丁香、

木香共有的成分:豆甾醇(stigmasterol,A3);玉簪花、甘草共有的成分:柚皮素(naringenin,B1);木香、甘草共有的成分:丁子香酚(mairin,C1)、谷甾醇(sitosterol,C2)。

通过 Cytoscape 3.10.3 构建“药物-活性成分-靶点”互作网络,见图 1。并基于网络拓扑学度值分析确定核心节点。结果显示,槲皮素(quercetin)、柚皮素(naringenin)及苯海拉明(benethamine)的度值排名前三,推测为治疗急性咽炎的关键活性成分,见表 2。

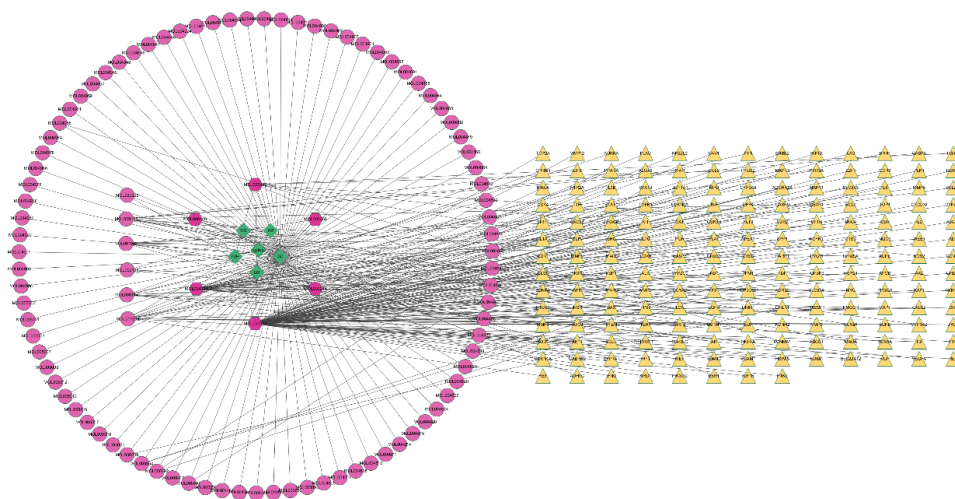


图 1 药物-活性成分-靶点网络图

表 1 QYLWS 活性成分信息

药材	MOL ID	编号	化合物名称	OB (%)	DL	
丁香 (DX)	MOL000358	D1	beta-sitosterol	36.91	0.75	
	MOL001749	D2	ZINC03860434	43.59	0.35	
	MOL013219	D3	Strictosamide Qt	76.3	0.76	
玉簪花 (YZH)	MOL002783	Y1	Cumalic acid	43.09	0.02	
	MOL011634	Y2	Benethamine	73.95	0.08	
	MOL000114	Y4	vanillic acid	35.47	0.04	
	MOL002818	Y5	Piceol	36.80	0.02	
	MOL000239	G1	Jaranol	50.83	0.29	
	MOL000354	G2	isorhamnetin	49.6	0.31	
	MOL000392	G3	formononetin	69.67	0.21	
	MOL000417	G4	Calycosin	47.75	0.24	
	MOL000497	G5	licochalcone a	40.79	0.29	
	甘草 (GC)	MOL000500	G6	Vestitol	74.66	0.21
		MOL001484	G7	Inermine	75.18	0.54
		MOL001792	G8	DFV	32.76	0.18
MOL002311		G9	Glycyrol	90.78	0.67	
MOL002565		G10	Medicarpin	49.22	0.34	
MOL003656		G11	Lupiwighteone	51.64	0.37	
MOL003896		G12	7-Methoxy-2-methyl isoflavone	42.56	0.2	

MOL004805	G13	(2S)-2-[4-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-8,8-dimethyl-2,3-dihydropyrano[2,3-f]chromen-4-one	31.79	0.72
MOL004806	G14	euchrenone	30.29	0.57
MOL004808	G15	glyasperin B	65.22	0.44
MOL004810	G16	glyasperin F	75.84	0.54
MOL004811	G17	Glyasperin C	45.56	0.4
MOL004814	G18	Isotrifoliol	31.94	0.42
MOL004815	G19	(E)-1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-(2,2-dimethylchromen-6-yl)prop-2-en-1-one	39.62	0.35
MOL004820	G20	kanzonols W	50.48	0.52
MOL004824	G21	(2S)-6-(2,4-dihydroxyphenyl)-2-(2-hydroxypropan-2-yl)-4-methoxy-2,3-dihydrofuro[3,2-g]chromen-7-one	60.25	0.63
MOL004827	G22	Semilicoisoflavone B	48.78	0.55
MOL004828	G23	Glepidotin A	44.72	0.35
MOL004829	G24	Glepidotin B	64.46	0.34
MOL004833	G25	Phaseolinisoflavan	32.01	0.45
MOL004835	G26	Glypallichalcone	61.6	0.19
MOL004838	G27	8-(6-hydroxy-2-benzofuranyl)-2,2-dimethyl-5-chromenol	58.44	0.38
MOL004841	G28	Licochalcone B	76.76	0.19
MOL004848	G29	licochalcone G	49.25	0.32
MOL004849	G30	3-(2,4-dihydroxyphenyl)-8-(1,1-dimethylprop-2-enyl)-7-hydroxy-5-methoxy-coumarin	59.62	0.43
MOL004855	G31	Licoricone	63.58	0.47
MOL004856	G32	Gancaonin A	51.08	0.4
MOL004857	G33	Gancaonin B	48.79	0.45
MOL004863	G34	3-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-8-(3-methylbut-2-enyl)chromone	66.37	0.41
MOL004864	G35	5,7-dihydroxy-3-(4-methoxyphenyl)-8-(3-methylbut-2-enyl)chromone	30.49	0.41
MOL004866	G36	2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-6-(3-methylbut-2-enyl)chromone	44.15	0.41
MOL004879	G37	Glycyrin	52.61	0.47
MOL004882	G38	Licocoumarone	33.21	0.36
MOL004883	G39	Licoisoflavone	41.61	0.42
MOL004884	G40	Licoisoflavone B	38.93	0.55
MOL004885	G41	licoisoflavone	52.47	0.54
MOL004891	G42	shinpterocarpin	80.3	0.73
MOL004898	G43	(E)-3-[3,4-dihydroxy-5-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-1-(2,4-dihydroxyphenyl)prop-2-en-1-one	46.27	0.31
MOL004903	G44	liquiritin	65.69	0.74
MOL004904	G45	licopyranocoumarin	80.36	0.65
MOL004907	G46	Glyzaglabrin	61.07	0.35
MOL004908	G47	Glabridin	53.25	0.47
MOL004910	G48	Glabranin	52.9	0.31
MOL004911	G49	Glabrene	46.27	0.44
MOL004912	G50	Glabrone	52.51	0.5

	MOL004913	G51	1,3-dihydroxy-9-methoxy-6-benzofurano[3,2-c]chromenone	48.14	0.43
	MOL004914	G52	1,3-dihydroxy-8,9-dimethoxy-6-benzofurano[3,2-c]chromenone	62.9	0.53
	MOL004915	G53	Eurycarpin A	43.28	0.37
	MOL004924	G54	(-)-Medicocarpin	40.99	0.95
	MOL004935	G55	Sigmoidin-B	34.88	0.41
	MOL004941	G56	(2R)-7-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl) chroman-4-one	71.12	0.18
	MOL004945	G57	(2S)-7-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-8-(3-methylbut-2-enyl) chroman-4-one	36.57	0.32
	MOL004948	G58	Isoglycyrol	44.7	0.84
	MOL004949	G59	Isolicoflavanol	45.17	0.42
	MOL004957	G60	HMO	38.37	0.21
	MOL004959	G61	1-Methoxyphaseollidin	69.98	0.64
	MOL004961	G62	Quercetin der.	46.45	0.33
	MOL004966	G63	3'-Hydroxy-4'-O-Methylglabridin	43.71	0.57
	MOL004974	G64	3'-Methoxyglabridin	46.16	0.57
	MOL004978	G65	2-[(3R)-8,8-dimethyl-3,4-dihydro-2H-pyrano[6,5-f]chromen-3-yl]-5-methoxyphenol	36.21	0.52
	MOL004980	G66	Inflacoumarin A	39.71	0.33
	MOL004985	G67	icos-5-enoic acid	30.7	0.2
	MOL004988	G68	Kanzonol F	32.47	0.89
	MOL004989	G69	6-prenylated eriodictyol	39.22	0.41
	MOL004990	G70	7,2',4'-trihydroxy-5-methoxy-3-arylcoumarin	83.71	0.27
	MOL004991	G71	7-Acetoxy-2-methylisoflavone	38.92	0.26
	MOL004993	G72	8-prenylated eriodictyol	53.79	0.4
	MOL004996	G73	gadelaidic acid	30.7	0.2
	MOL005000	G74	Gancaonin G	60.44	0.39
	MOL005001	G75	Gancaonin H	50.1	0.78
	MOL005003	G76	Licoagrocarpin	58.81	0.58
	MOL005007	G77	Glyasperins M	72.67	0.59
	MOL005008	G78	Glycyrrhiza flavonol A	41.28	0.6
	MOL005012	G79	Licoagroisoflavone	57.28	0.49
	MOL005016	G80	Odoratin	49.95	0.3
	MOL005017	G81	Phaseol	78.77	0.58
	MOL005018	G82	Xambioona	54.85	0.87
	MOL005020	G83	dehydroglyasperins C	53.82	0.37
	MOL001002	H1	ellagic acid	43.06	0.43
	MOL002276	H2	Sennoside E <sub>qt</sub>	50.69	0.61
	MOL006376	H3	7-Dehydrosigmasterol	37.42	0.75
	MOL006826	H4	chebulic acid	72	0.32
诃子 (HZ)	MOL009135	H5	ellipticine	30.82	0.28
	MOL009136	H6	Peraksine	82.58	0.78
	MOL009137	H7	(R)-(6-methoxy-4-quinolyl)-[(2R,4R,5S)-5-vinylquinuclidin-2-yl]methanol	55.88	0.4
	MOL009149	H8	Cheilanthisfoline	46.51	0.72
	MOL010813	M1	Benzo[a]carbazole	35.22	0.22
木香 (MX)	MOL010828	M2	cynaropicrin	67.5	0.38
	MOL010839	M3	lappadilactone	38.56	0.73

表 2 共有成分

MOL ID	编号	化合物名称	OB (%)	DL
MOL000422	A1	kaempferol	41.88	0.24
MOL000098	A2	quercetin	46.43	0.28
MOL000449	A3	Stigmasterol	43.83	0.76
MOL004328	B1	naringenin	59.29	0.21
MOL000211	C1	Mairin	55.38	0.78
MOL000359	C2	sitosterol	36.91	0.75

表 3 排名前 3 位化合物

化合物	Mol ID	Degree 值	
槲皮素	quercetin	MOL000098	93
柚皮素	naringenin	MOL004328	30
苯海拉明	Benethamine	MOL011634	15

## 2.2 疾病靶点搜集

通过 GeneCards 数据库与 OMIM 数据库联合检索, 以“Acute pharyngitis”为关键词系统搜集疾病相关靶点。从 OMIM 数据库获取的靶点去重后得到 160 个疾病靶点, 未设置 Relevance score 阈值。从 GeneCards 数据库得到 3259 个靶点, 经 Relevance score 阈值  $\geq 4.42$  中位数筛选得到 1630 个疾病靶点。将两个数据库获得的靶点合并去重后得到急性咽炎相关靶点 1764 个。

## 2.3 交集靶点 PPI 网络构建

采用 Venny 2.1 在线工具对 QYLWS 药物靶点与急性咽炎疾病靶点进行交集分析, 获得共有靶点 179 个,

见图 2。将交集靶点数据导入 STRING 数据库 (置信度阈值  $>0.4$ ), 筛选得到蛋白质相互作用网络, 并导出 TSV 格式文件。通过 Cytoscape 3.10.3 软件构建 PPI 网络可视化图, 其中节点按度值 (degree) 绘制为同心圆, 节点大小及颜色深度与其度值呈正相关 (节点越大、颜色越深, 表示网络中心性越强), 网络拓扑分析结果, 见图 3。右侧图表展示度值排名前 10 位的关键靶点。

进一步利用 Centiscape 2.2、CytoNCA 插件进行拓扑分析, 按度值筛选出核心靶点, 见表 3。结果显示, AKT1、IL6、TP53、TNF、CASP3 等 10 个靶点可能作为 QYLWS 治疗急性咽炎的关键调控节点。

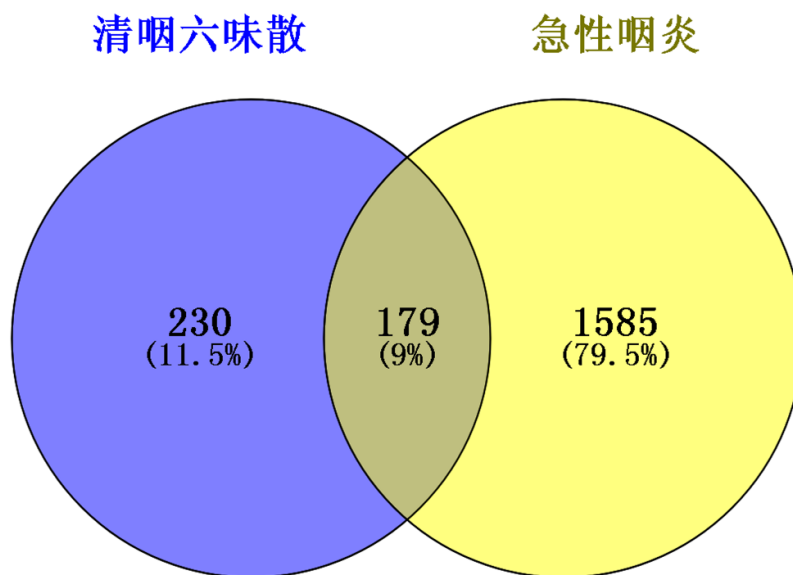


图 2 QYLWS 靶点基因与 AP 相关靶点的韦恩图

注: 清咽六味散靶点 230 个、共有靶点 179 个、急性咽炎独有靶点 1585 个

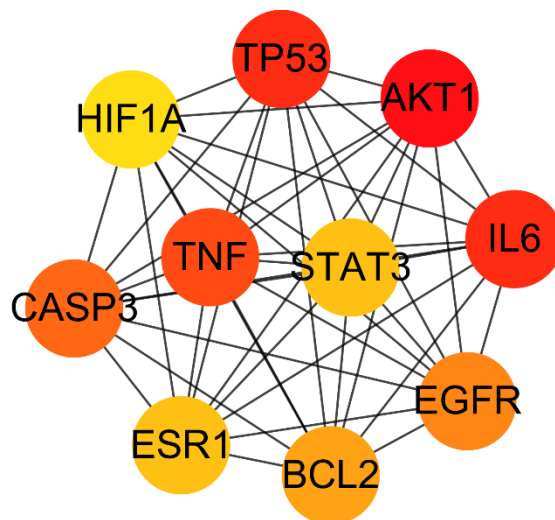


图3 药物-疾病靶点 PPI 网络图

表4 排名前10位关键靶点

靶点名称	Degree 值	靶点名称	Degree 值
AKT1	141	EGFR	124
IL6	135	BCL2	123
TP53	135	ESR1	122
TNF	133	STAT3	122
CASP3	129	HIF1A	121

#### 2.4 GO 及 KEGG 富集分析成果

利用 DAVID 数据库对药物-疾病交集靶点进行 GO 和 KEGG 富集分析，以  $P < 0.05$  为显著性阈值。GO 分析结果显示：

(1) 生物学过程 (BP)：共识别 672 个条目，主要涉及对外部生物刺激 (response to external biotic stimulus)、细胞凋亡负向调控 (negative regulation of apoptotic process) 及基因表达正向调控 (positive regulation of gene expression) 等；

(2) 细胞组分 (CC)：共 91 个条目，主要富集于细胞外区域 (extracellular region)、蛋白质复合物 (protein-containing complex) 及膜筏 (membrane raft) 等；

(3) 分子功能 (MF)：共 127 个条目，主要涉及同源蛋白质结合 (identical protein binding)、酶结合 (enzyme binding) 及蛋白质酪氨酸激酶活性 (protein tyrosine kinase activity) 等。

(4) KEGG 通路分析共发现 168 条显著通路 ( $P < 0.05$ )，主要富集于癌症相关途径 (pathways in cancer)、脂质代谢与动脉粥样硬化 (lipid metabolism and atherosclerosis) 及 PI3K-Akt 信号通路 (PI3K-Akt

signaling pathway) 等。

分析表明，QYLWS 可能通过调控上述生物过程及信号通路网络发挥治疗急性咽炎的作用。为直观展示关键富集结果，本文选取 GO 分析中排名前 10 位及 KEGG 分析中排名前 20 位的条目进行可视化，见图 4、5。

#### 2.5 药物-靶点-通路-疾病网络图构建

利用 Cytoscape 软件构建了“药物-靶点-通路-疾病”四维互作网络，整合 QYLWS 5 种核心药材、179 个交集靶点及前 20 条核心信号通路，见图 6。网络节点采用标准化符号系统：

(1) 六角形节点：代表 QYLWS 的药物成分 (如丁香、甘草等)

(2) 圆形节点：表征药物在急性咽炎治疗中的关键作用靶点

(3) 棱形节点：指示调控疾病进程的核心信号通路

网络拓扑分析揭示，QYLWS 通过“成分-靶点-通路”的多层次调控网络，协同作用于炎症反应、免疫调节及细胞凋亡等关键生物学过程，证实其治疗急性咽炎具有多靶点、多通路的整合作用机制。

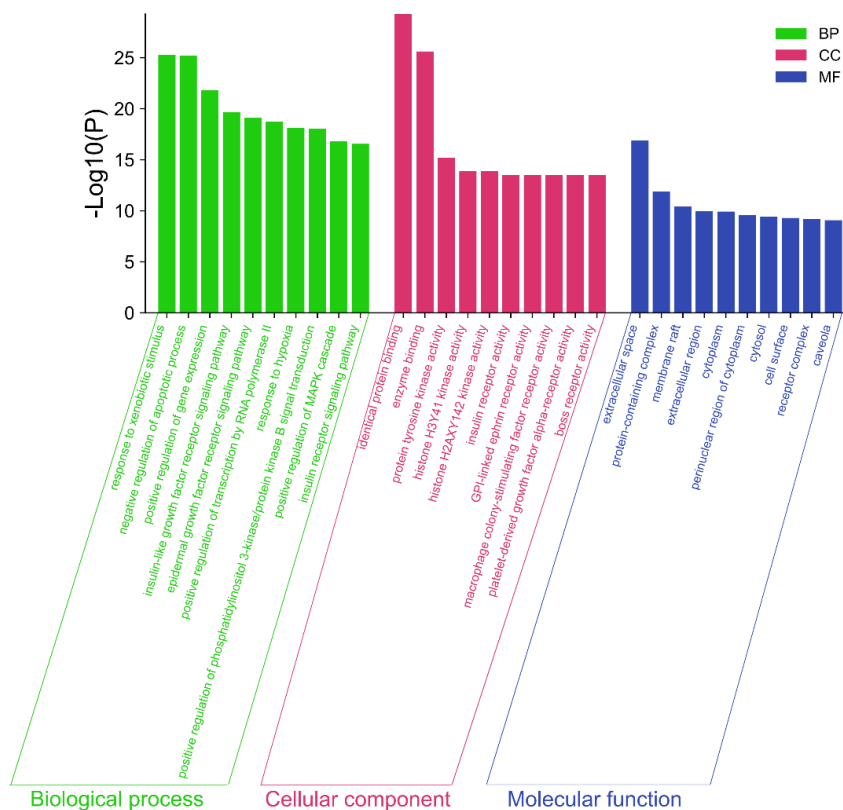


图 4 核心靶点 GO 富集分析图

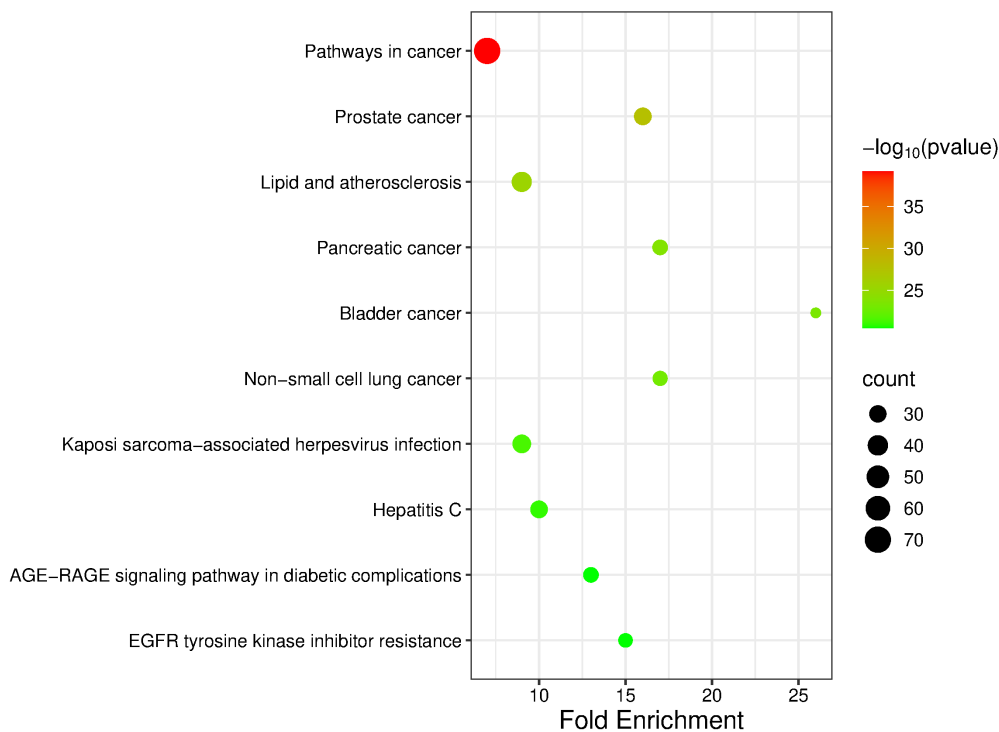


图 5 核心靶点 KEGG 通路富集分析图

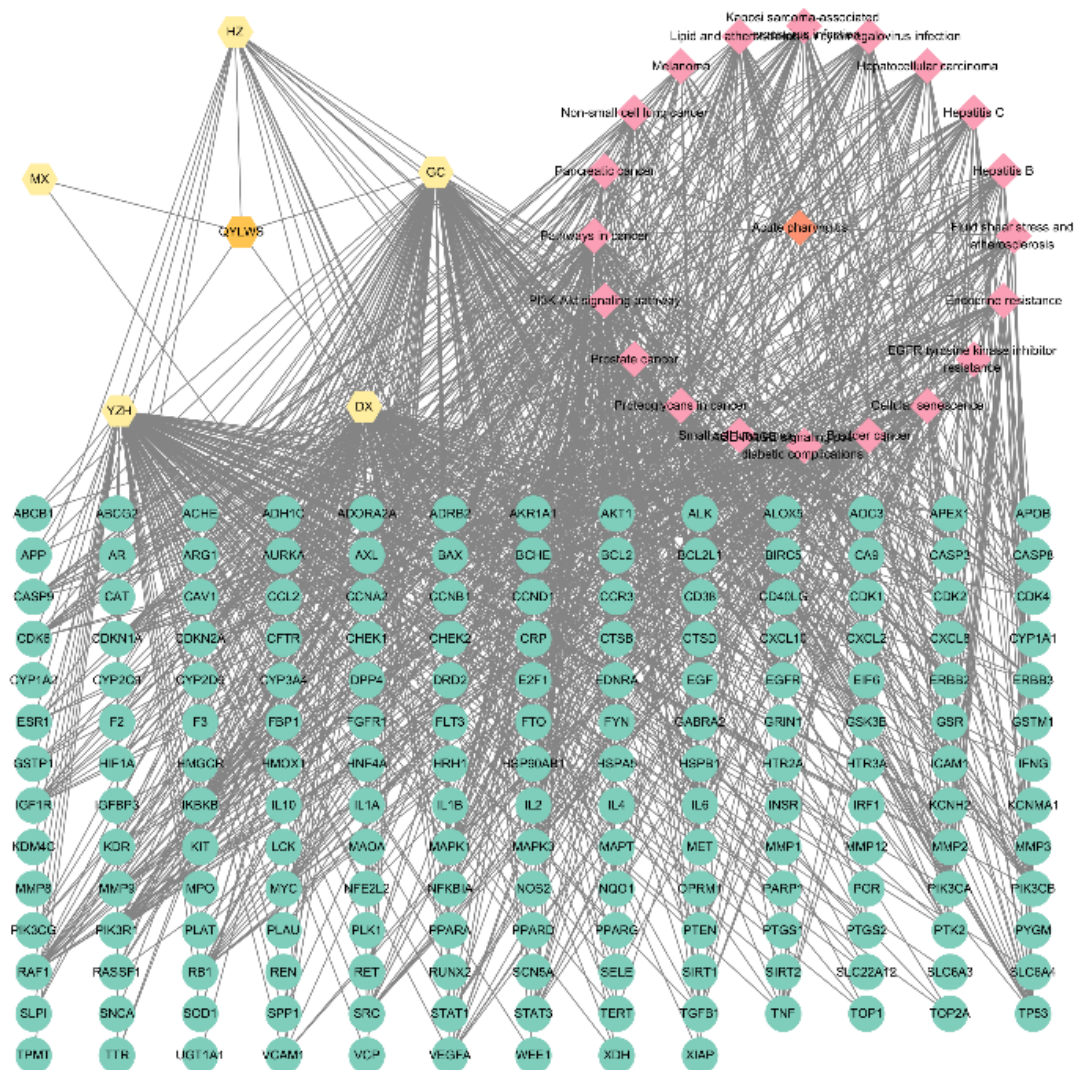


图 6 药物—靶点—通路—疾病网络图

2.6 分子对接分析结果

选取度值排名前三的活性成分（槲皮素、柚皮素、苯海拉明）作为配体，与核心靶点 AKT1、IL6、TP53、TNF、CASP3 进行分子对接分析。根据文献报道，结合能（binding energy）低于-5.0 kcal/mol 时，分子对接构象具有显著结合稳定性<sup>[8]</sup>。分析结果显示，三种配体与五种受体均能形成稳定的结合构象，其中 81.67%的

对接组合结合能低于-5.0 kcal/mol。特别值得注意的是，AKT1-槲皮素（-5.91 kcal/mol）、TP53-槲皮素（-6.89 kcal/mol）、TNF-槲皮素（-5.83 kcal/mol）、TNF-柚皮素（-6.76 kcal/mol）、AKT1-苯海拉明（-5.98 kcal/mol）及 TP53-苯海拉明（-6.23 kcal/mol）等组合表现出更强的结合亲和力。具体对接参数详，见表 4，典型结合构象可视化结果，见图 7。

表 5 活性成分/关键靶点结合能（kcal/mol）

活性成分/关键靶点	摩尔亲和能				
	AKT1	IL6	TP53	TNF	CASP3
quercetin	-5.91	-5.39	-6.89	-5.83	-5.05
naringenin	-5.36	-5.53	-5.53	-6.76	-5.07
Benethamine	-5.98	-5.68	-6.32	-5.75	-4.81

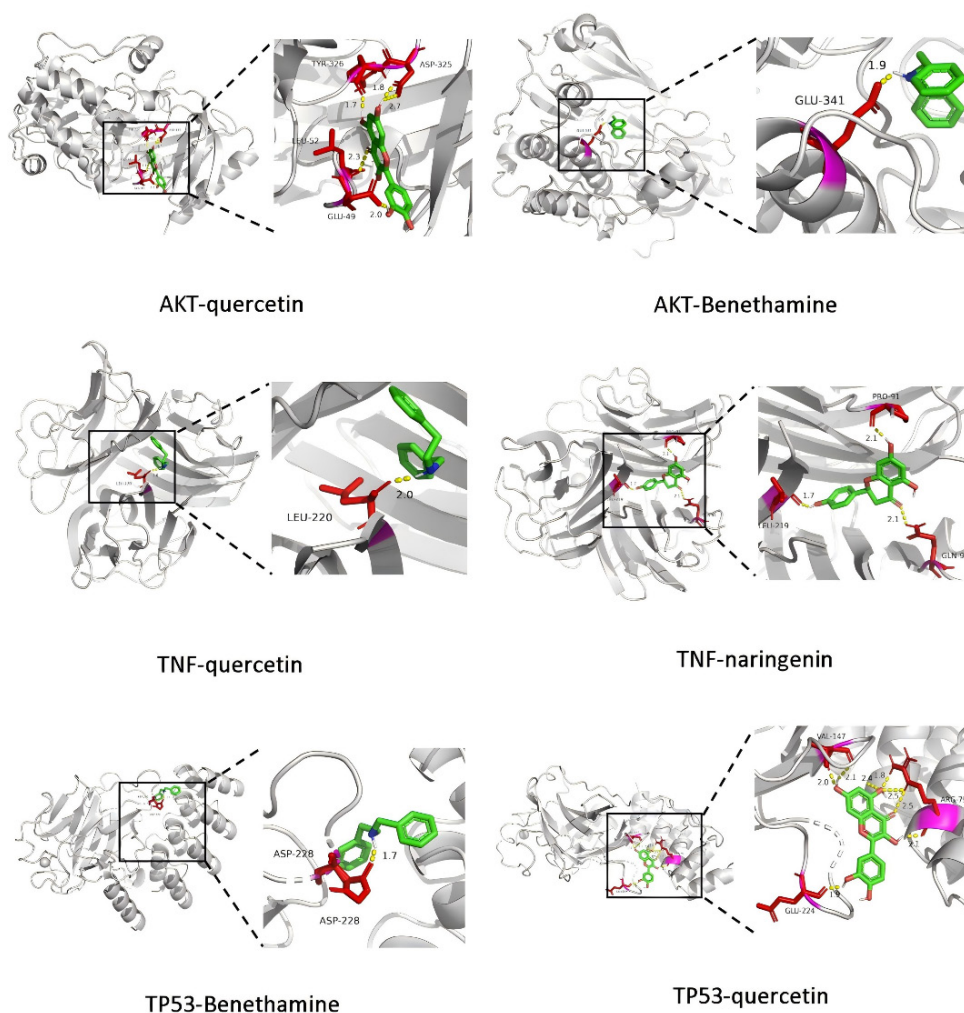


图7 分子对接图

### 3 讨论

QYLWS 作为蒙医经典方剂，以丁香为君药，发挥利咽消肿之效；辅以玉簪花清咽热、止咳平喘；臣以石膏清肺热、甘草祛痰止咳兼滋补；佐以木香祛痰降逆、诃子调和体素，共奏清热解毒、利咽止咳之功。现代药理研究证实，丁香水提取物具有抗血栓形成作用<sup>[9]</sup>，诃子对多种致病菌表现出显著抗菌活性，甘草中黄酮类成分（如甘草次酸胆碱）镇咳祛痰效果突出，木香提取物可拮抗支气管收缩并增强抗感染免疫效应<sup>[9]</sup>，为方剂疗效提供了科学依据。

本研究采用网络药理学方法，系统揭示了 QYLWS 治疗急性咽炎的作用机制。通过构建“药物-成分-靶点-通路”网络，筛选出槲皮素、柚皮素、苯海拉明为核心活性成分，AKT1、IL6、TP53、TNF、CASP3 为关键靶点。分子对接验证显示，槲皮素与 AKT1、TP53 结合力较强，提示其可能通过抑制 PI3K/Akt 信

号通路（调控血管通透性及炎症反应<sup>[10-12]</sup>）发挥抗炎作用；TP53 作为肿瘤抑制因子，在细胞应激中激活抗肿瘤反应<sup>[13]</sup>；TNF 受体表达受炎症调节<sup>[14]</sup>，IL-6 则参与免疫炎症级联反应<sup>[15]</sup>，共同构成多靶点调控网络。

活性成分机制分析表明，槲皮素及其衍生物具有免疫调节、抗病毒及慢性病预防作用<sup>[16-18]</sup>，柚皮素兼具保肝、抗动脉粥样硬化和免疫调节功能<sup>[19]</sup>，苯海拉明则通过抗过敏途径缓解炎症<sup>[20]</sup>。这些成分通过协同作用，形成“成分-靶点-通路”的级联调控网络，最终实现抑制炎症因子释放、调节免疫平衡的治疗效果。

基于上述预测，结合最近发布的《急性咽炎中医病证诊断与疗效评价专家共识》<sup>[21]</sup>，以 IL-6 和 TNF- $\alpha$  为阈值的炎症分层策略，可优先纳入 PI3K-Akt 通路过度激活的患者设计临床研究方案，不仅提升疗效信号检出率，更通过聚焦机制核心，为蒙药复方“辨证论治”提供分子层面的诠释。也可设计“炎症-通路-成分”三

维标志物体系实现从宏观表型到微观机制的闭环验证,显著提升疗效评估的客观性与特异性,能规避VAS评分的主观偏差,更契合现代精准医学对“生物标志物驱动治疗”的要求。也可设计以机制验证为核心的II期随机双盲对照试验框架:以IL-6降幅 $\geq 40\%$ 为主要终点,联合CASP3活性与咽痛VAS评分作为次要终点,构建“机制-临床”双轨评价体系;剂量探索基于槲皮素安全窗(300–900 mg/d),避免III期盲目投入。

需指出的是,本研究仍存在局限:网络药理学预测依赖数据库完整性,部分潜在靶点可能未被收录;血浆成分浓度与组织靶点活性的时序关系尚未通过体内实验验证;患者分层阈值需在独立队列中进一步验证。未来研究应结合单细胞转录组与代谢组学,解析QYLWS在咽部黏膜微环境中的动态作用网络,并开展多中心前瞻性队列研究,以确立其在急性咽炎精准分型中的临床适用边界。

### 参考文献

- [1] 孔庆新, 东方, 孙兰, 等. 荔枝草治疗急性咽炎有效部位筛选[J]. 世界科学技术-中医药现代化, 2022,24(2):686-693.
- [2] Anjos L M M, Marcondes M B, Lima M F, et al. Streptococcal Acute Pharyngitis[J]. REVISTA DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE MEDICINA TROPICAL, 2014,47.
- [3] Cots J M, Alos J, Barcena M, et al. Recommendations for management of acute pharyngitis in adults[J]. Acta Otorrinolaringol Esp, 2015,66(3):159-170.
- [4] 乌兰图雅, 包勒朝鲁. QYLWS 治疗急性咽炎的研究进展[J]. 世界临床药物, 2022,43(8):1063-1066.
- [5] 苏日固格. 蒙医药治疗慢性咽炎临床观察[J]. 中国民族医药杂志, 2018,24(10):29.
- [6] 红霞. 《中华人民共和国卫生部药品标准》蒙药分册药材部分内容补正(上)[J]. 中国民族医药杂志, 2008,14(3):35-38.
- [7] 康秀荣, 康沃德乐, 董翠艳. 蒙药 QYLWS 抗炎作用机制研究[J]. 中国民族医药杂志, 2018,24(12):34-37.
- [8] 李洵珣, 金晨, 陈康, 等. 基于网络药理学和分子对接分析丰城鸡血藤治疗乳腺癌的分子靶点和机制[J]. 中国药理学通报, 2022,38(5):767-775.
- [9] 赛罕其格. 木香药理研究进展和临床应用[J]. 中国蒙医药(蒙), 2024,19(3):122-126.
- [10] Wetzker R, Rommel C. Phosphoinositide 3-kinases as targets for therapeutic intervention[J]. Curr Pharm Des, 2004, 10(16):1915-1922.
- [11] Di Lorenzo A, Fernandez-Hernando C, Cirino G, et al. Akt1 is critical for acute inflammation and histamine-mediated vascular leakage[J]. Proc Natl Acad Sci U S A, 2009, 106(34):14552-14557.
- [12] Scaldaferrri F, Vetrano S, Sans M, et al. VEGF-A links angiogenesis and inflammation in inflammatory bowel disease pathogenesis[J]. Gastroenterology, 2009,136(2):585-595.
- [13] Bradley J R. TNF-mediated inflammatory disease[J]. J Pathol, 2008,214(2):149-160.
- [14] Mukhopadhyay S, Hoidal J R, Mukherjee T K. Role of TNFalpha in pulmonary pathophysiology[J]. Respir Res, 2006,7(1):125.
- [15] Kang S, Narazaki M, Metwally H, et al. Historical overview of the interleukin-6 family cytokine[J]. J Exp Med, 2020,217(5).
- [16] Di Petrillo A, Orru G, Fais A, et al. Quercetin and its derivatives as antiviral potentials: A comprehensive review[J]. Phytother Res, 2022,36(1):266-278.
- [17] Wang Q, Yang J, Zhang X, et al. Practical Synthesis of Naringenin[J]. Journal of Chemical Research, 2015,39:455-457.
- [18] Salehi B, Fokou P V T, Sharifi-Rad M, et al. The Therapeutic Potential of Naringenin: A Review of Clinical Trials[J]. Pharmaceuticals (Basel), 2019,12(1).
- [19] Pinho-Ribeiro F A, Zarpelon A C, Fattori V, et al. Naringenin reduces inflammatory pain in mice[J]. Neuropharmacology, 2016,105:508-519.
- [20] 郭静微. 苯海拉明联合复方氟米松软膏对接触性皮炎患者炎症因子水平及免疫功能的影响[J]. 实用医技杂志, 2020,27(7):892-893.
- [21] 赵飞燕, 高蕊, 刘静, 等. 急性咽炎中医病证诊断与疗效评价专家共识[J]. 中国循证医学杂志, 2025,25(09):993-1000.

版权声明: ©2026 作者与开放获取期刊研究中心(OAJRC)所有。本文章按照知识共享署名许可条款发表。

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



OPEN ACCESS