

决明子治疗便秘的作用机制—基于网络药理学分析



孙琪琪¹, 毛维蕾¹, 王宇恒¹, 袁 梦¹, 吴鑫雨¹, 严海龙¹, 王 坤^{1, 2}

1. 四川科技职业学院药学院 (四川眉山 620500)

2. 西南大学药学院&中医药学院/重庆市高校中药新药筛选重点实验室 (重庆 400715)

【摘要】目的 本研究旨在利用网络药理学结合分子对接及分子动力学模拟技术, 探讨决明子治疗便秘的潜在分子机制, 为中药现代化和开发提供参考。**方法** 从 TCMSP 数据库筛选决明子的化学成分, 按口服生物利用度 (OB) $\geq 30\%$ 和类药性 (DL) ≥ 0.18 筛选潜在活性成分 (按 OB 值由高至低排序)。通过 SwissTargetPrediction 预测成分的作用靶点, 从 GeneCards 和 OMIM 数据库获取便秘相关疾病靶点, 经 Venny 2.1.0 筛选共同治疗靶点。构建“成分-靶点-疾病”网络分析关键节点, 对关键靶点进行 GO 功能分析和 KEGG 通路富集分析; 采用 AutoDockVina 进行分子对接, GROMACS 开展 100 ns 分子动力学模拟验证复合物稳定性。**结果** 筛选出 14 个活性成分, 核心成分为芦荟大黄素、豆甾醇、决明素; 预测得到 54 个潜在靶点, 与便秘相关的靶点 48 个, 核心靶点为前列腺素内过氧化物合酶 2 (PTGS2)、肿瘤坏死因子 (TNF)、肿瘤蛋白 p53 (TP53)。分子对接显示, 芦荟大黄素、豆甾醇、决明素与核心靶点结合构象稳定; 动力学模拟验证复合物在生理环境下保持稳态。**结论** 决明子通过芦荟大黄素、豆甾醇、决明素等活性成分, 靶向调控 TNF、PTGS2 等核心靶点, 干预炎症反应、神经调节等多条通路发挥抗便秘作用。

【关键词】 决明子; 便秘; 网络药理学; 分子对接; 分子动力学模拟; 前列腺素内过氧化物合酶 2; 肿瘤坏死因子

【中图分类号】 R961

【文献标识码】 A

The mechanism of action of Cassiae Semen for constipation based on network pharmacology analysis

SUN Qiqi¹, MAO Weiru¹, WANG Yuheng¹, YUAN Meng¹, WU Xinyu¹, YAN Hailong¹, WANG Kun^{1,2}

1. School of Pharmacy, Sichuan Vocational College of Science and Technology, Meishan 620500, Sichuan Province, China

2. School of Pharmacy & School of Traditional Chinese Medicine, Southwest University, Chongqing Key Laboratory for Screening of New Traditional Chinese Medicines in Colleges and Universities, Chongqing 400715, China

Corresponding author: WANG Kun, Email: 1572608781@qq.com

【Abstract】Objective To investigate the potential molecular mechanisms underlying Cassiae Semen in treating constipation by integrating network pharmacology with molecular docking and molecular dynamics (MD) simulations, and provide references for the modernization of traditional Chinese medicine (TCM) and drug development. **Methods** Chemical constituents

DOI: 10.12173/j.issn.2097-4922.202509003

基金项目: 四川科技职业学院课题一般项目

通信作者: 王坤, 硕士, Email: 1572608781@qq.com

<https://yxqy.whuznhmedj.com>

of Cassiae Semen were initially screened from the TCMSP database. Potential bioactive compounds were selected based on oral bioavailability (OB) $\geq 30\%$ and drug-likeness (DL) ≥ 0.18 , ranked in descending order by OB values. The target proteins of these compounds were predicted using SwissTargetPrediction. Constipation-related disease targets were retrieved from the GeneCards and OMIM databases. Overlapping targets between the compound targets and constipation-associated targets were identified using Venny 2.1.0. A "compound-target-disease" network was constructed to analyze key nodes. Functional enrichment analysis was performed using GO function and KEGG pathway analysis for the core targets. Molecular docking was conducted using AutoDockVina, and a 100 ns molecular dynamics simulation was performed using GROMACS to validate the stability of protein-ligand complexes. **Results** A total of 14 bioactive compounds were identified, with aloe-emodin, stigmasterol, and obtusin as the core components. A total of 54 potential targets were predicted, among which 48 were associated with constipation. The core targets included prostaglandin-endoperoxide synthase 2 (PTGS2), tumor necrosis factor (TNF), and tumor protein P53 (TP53). Molecular docking reveals that aloe-emodin, stigmasterol, and obtusin bind stably to the core targets. Dynamic simulations validate that the complex maintains homeostasis under physiological conditions. **Conclusion** Cassiae Semen exerts their anti-constipation effects by targeting key pathways such as TNF and PTGS2 through active constituents including aloe-emodin, stigmasterol, and obtusin, thereby modulating inflammatory responses and neuromodulation.

【Keywords】 Cassiae Semen; Constipation; Network pharmacology; Molecular docking; Molecular dynamics simulation; Prostaglandin-endoperoxide synthase 2; Tumor necrosis factor

便秘是一种常见的消化系统疾病，其发病原因复杂，涉及肠道生理功能紊乱、神经内分泌调节失衡、环境因素及遗传因素等多方面^[1]。临床表现为排便次数减少、粪便干结、排便困难等，严重影响患者的生活质量^[2]。决明子为豆科植物决明或小决明的干燥成熟种子，是药食同源的中药材^[3]。中医认为其性寒，味甘、苦，具有清肝明目、润肠通便等功效，常用于治疗便秘、目赤涩痛等疾病。现代药理学研究表明，决明子含有蒽醌类、黄酮类、多糖类等多种化学成分，其中蒽醌类成分如大黄酚、大黄素等具有显著的致泻作用，可刺激肠道蠕动，促进排便^[4]。

随着系统生物学和计算生物学的发展，网络药理学逐渐成为研究中药作用机制的新模式^[5]。其从整体观念出发，通过构建网络，分析药物与靶点、疾病之间的复杂关系，为中药多成分、多靶点、多途径的作用特点提供了新的研究思路^[6]。分子对接和分子动力学模拟作为计算生物学的重要技术手段，可在分子水平上深入揭示药物与靶点的相互作用机制^[7]。此外，分子对接能够预测小分子药物与生物大分子靶标的结合模式和亲和力，而分子动力学模拟则可模拟生物分子在生理环境下的动态变化，进一步验证结合的稳定性和可靠性^[8]。

本研究旨在结合网络药理学、分子对接和分子动力学模拟方法，深入探讨决明子治疗便秘的作用机制，为其临床应用和新药开发提供理论支持。通过对决明子化学成分的筛选、作用靶点的预测以及与便秘相关靶点的整合分析，构建网络并进行分子对接和动力学模拟实验，揭示其多成分协同作用的分子机制，为中药现代化研究和便秘治疗提供新的策略和靶点。

1 资料与方法

1.1 成分筛选与靶点预测

从 TCMSP 数据库 (<http://tcmspw.com>) 下载决明子的化学成分信息，结合口服生物利用度 (oral bioavailability, OB) $\geq 30\%$ 和类药性 (drug-likeness, DL) ≥ 0.18 筛选潜在活性成分，按 OB 值由高至低排序 (表 1)。利用 SwissTargetPrediction 在线工具 (<https://swisstargetprediction.ch/>) 预测这些成分的可能作用靶点，同时从 GeneCards (<https://www.genecards.org/>) 和 OMIM 数据库 (<https://www.omim.org/>) 收集便秘相关的疾病靶点，通过 Venny 2.1.0 工具取两者的交集，获得决明子治疗便秘的潜在作用靶点。

1.2 蛋白质-蛋白质相互作用网络图的构建

把共有靶点导入 STRING 数据库 (<https://yxyq.whuznhmedj.com>)

cn.string-db.org/), 选择物种仅限于“Homo sapiens”, 置信度得分设置为 ≥ 0.9 , 使用 Cytoscape 3.8.2 软件构建潜在关键靶点网络, 生成蛋白质-蛋白质相互作用 (protein-protein interaction networks, PPI) 网络图。将 PPI 信息导入 Cytoscape 3.8.2 筛选关键靶点, 选取排名靠前靶点为核心靶点。

1.3 生物通路富集分析

采用 DAVID 数据库 (<https://davidbioinformatics.nih.gov/>) 对关键靶点进行 GO 功能注释和 KEGG 通路富集分析。其中, GO 富集分析包含生物过程 (biological process, BP)、分子功能 (molecular function, MF) 和细胞组成 (cell component, CC) 3 个部分。

1.4 中药-成分-靶点-疾病调控网络的构建

使用 Cytoscape 3.8.2 软件构建“中药-成分-靶点-疾病”调控网络, 使用 Cytoscape 软件 (cytoHubba 插件) 对主要活性成分进行分析, 同时对网络图进行拓扑分析, 图中其度 (degree) 值越大节点越大, 作用力最强, 排名靠前的化合物为核心成分。

1.5 分子对接

选择 AutoDockTools 将决明子活性成分和关键靶点蛋白的结构分别转化为 pdbqt 格式, 利用 AutoDock Vina 进行分子对接, 计算结合能并分析结合构象, 筛选出与靶点结合稳定的成分。

1.6 分子动力学模拟

使用 Gromacs 2022 对复合物进行 100 ns 分子动力学模拟。蛋白质采用 Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics force field, version 36 (CHARMM36) 力场参数, 配体拓扑结构由 General AMBER Force Field, version 2 (GAFF2)

力场参数构建。采用周期性边界条件, 将蛋白质-配体复合物放置在立方盒中^[9]。采用 Transferable Intermolecular Potential with 3 Points (TIP3P) 水模型将水分子填充到盒子中, 形成周期边界为 1.2 nm 的水盒^[9]。使用粒子网格 Ewald (Particle Mesh Ewald, PME) 和 Verlet 算法分别处理静电相互作用。随后进行 100 000 步的等温等容系综平衡和等温等压系综平衡, 耦合常数为 0.1 ps, 持续时间为 100 ps 模拟。范德华和库仑相互作用均使用 1.0 nm 的截止值计算。最后, 在恒定温度 (310 K) 和恒压 (1 bar) 下利用 Gromacs 2022 进行了分子动力学模拟, 共计时长 100 ns。

2 结果

2.1 靶点筛选及PPI

从 TCMS 等数据库中共筛选出决明子中 14 种活性成分, 预测出 54 个潜在作用靶点, 从 GeneCards 和 OMIM 数据库中获得疾病交集靶标基因共 8 799 个, 与便秘相关的疾病靶点取交集后得到 48 个共同靶点。PPI 网络分析获得 614 条相互作用连线。见表 1 和图 1。

2.2 成分-靶点-疾病

构建的“成分-靶点-疾病”网络呈现出复杂的网络结构, 网络拓扑学分析发现核心成分 (豆甾醇、芦荟大黄素、决明素) 与核心靶点 [前列腺素内过氧化物合酶 2 (prostaglandin-endoperoxide synthase 2, PTGS2)、肿瘤坏死因子 (tumor necrosis factor, TNF)、肿瘤蛋白 p53 (tumor protein p53, TP53)] 具有较高的介数中心性和接近中心性, 表明其在决明子治疗便秘的过程中可能发挥关键作用。见图 2。

表1 决明子主要活性成分
Table 1. Main active components of Cassia Semen

序号	MOL	活性成分	分子量	OB (%)	DL
1	MOL000471	芦荟大黄素 (aloe-emodin)	270.25	83.38	0.24
2	MOL006475	决明素 (obtusin)	344.34	81.43	0.40
3	MOL000449	豆甾醇 (stigmasterol)	412.77	43.83	0.76
4	MOL002268	大黄酸 (rhein)	284.23	47.07	0.28
5	MOL002281	决明内酯 (toralactone)	272.27	46.46	0.24
6	MOL006466	镰刀菌丝红素 (rubrofusarin)	272.27	45.55	0.24
7	MOL006489	茜素二酮 (quinizarin)	240.22	47.34	0.19
8	MOL006481	葡萄糖基决明子素 (gluco-obtusifolin)	446.44	42.41	0.81
9	MOL006465	茜草素-6-β-龙胆二糖苷 (rubrofusarin-6-β-gentiobioside)	596.59	40.12	0.61
10	MOL005043	菜油甾醇 (campest-5-en-3β-ol)	400.76	37.58	0.71
11	MOL000953	3-β-羟基胆甾体-5-烯 (CLR)	386.73	37.87	0.68
12	MOL006472	橙黄决明素 (aurantio-obtusin)	330.31	31.55	0.37
13	MOL006486	钝叶皂苷 (obtusin)	344.34	31.24	0.40
14	MOL006482	9,10-二羟基-5,7-二甲氧基-3-甲基苯并 [g] 异色素-1-酮 (9,10-dihydroxy-7-methoxy-3-methylene-4h-benzo [g] isochromen-1-one)	272.27	63.25	0.24

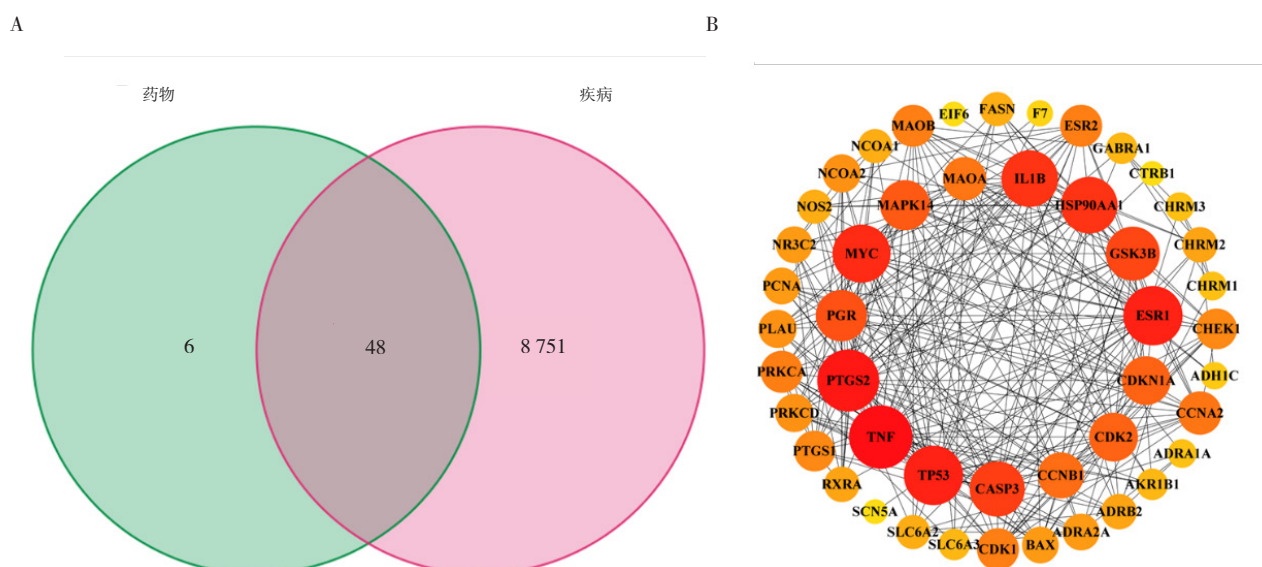


图1 决明子活性成分靶点与便秘靶点韦恩图及蛋白网络互作图

Figure 1. Venn diagram of active component targets of Cassiae Semen and constipation targets, and protein interaction network

注：A. 决明子活性成分靶点与便秘靶点韦恩图；B. 决明子治疗便秘PPI网络。

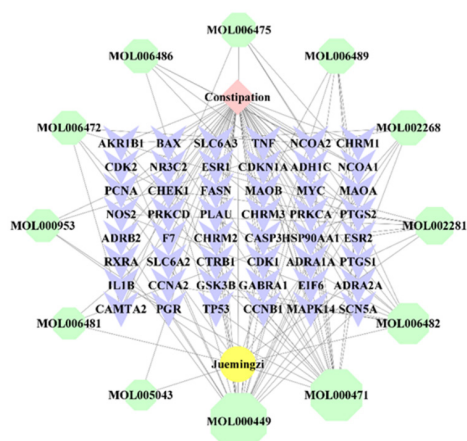


图2 决明子成分-靶点-疾病网络图

Figure 2. Cassiae Semen compound-target-disease network diagram

注：绿色：决明子活性成分；黄色：中药决明子；紫色：决明子治疗便秘靶点；粉色：疾病便秘。

2.3 GO功能与KEGG富集分析

GO 功能富集分析显示，决明子治疗便秘所涉及 BP 主要包括：对异生物刺激的反应（response to xenobiotic stimulus）、细胞对非生物刺激的反应（cellular response to abiotic stimulus）、对环境刺激的反应（response to environmental stimulus）等；所涉及 CC 主要有突触膜（synaptic membrane）、突触后膜（postsynaptic membrane）、细胞周期蛋白依赖性蛋白激酶全酶复合物（cyclin-dependent protein kinase holoenzyme complex）；所涉及 MF 主要有 DNA 结合型转录因子结合

（DNA-binding transcription factor binding）、RNA 聚合酶 II 特异性 DNA 结合型转录因子结合（RNA polymerase II-specific DNA-binding transcription factor binding）、G 蛋白偶联胺受体活性（G protein-coupled amine receptor activity），见图3A。KEGG 富集分析与便秘相关的主要信号通路包括：神经退行性变的途径-多种疾病（pathways of neurodegeneration-multiple diseases）、脂质与动脉粥样硬化（lipid and atherosclerosis）、PI3K-Akt 信号通路（PI3K-Akt signaling pathway）等，见图3B。

2.4 分子对接

选取关键成分与靶点进行分子对接，核心成分芦荟大黄素与核心靶点 PTGS2、TNF、TP53 的结合能分别为 -9.2、-4.9、-8.4 kcal/mol，豆甾醇与核心靶点的结合能分别为 -9.0、-5.2、-7.2 kcal/mol，决明素与核心靶点的结合能分别为 -8.8、-7.5、-7.8 kcal/mol，结合构象均稳定。芦荟大黄素的羟基与氨基酸残基形成了氢键，苯环部分嵌入靶点的疏水口袋中，有利于增强二者的相互作用（图4）。

2.5 分子动力学模拟

由于分子对接采用的半柔性对接目前无法考虑蛋白质结构的柔性，为进一步证明配体与蛋白质之间结合的程度与稳定性，本文对热休克蛋白 90α 家族 A 类成员 1（heat shock protein 90 alpha family class A member 1, HSP90AA1）与豆甾醇、

芦荟大黄素的对接结果进行了 100 ns 的分子动力学模拟。图中均方根波动 (root mean square fluctuation, RMSF) 曲线代表氨基酸残基在动力学模拟过程中波动的程度, 较低 RMSF 值代表氨基酸残基波动小, 结构稳定。均方根误差 (root mean square deviation, RMSD) 曲线是判断蛋白质配体复合物稳定性的指标, RMSD 曲线越平稳代表复合物越稳定。回转半径 (radius of gyration, Rg) 曲线用于表征结构的紧密程度与稳定性, 小的 Rg 说明在动力学模拟中, 体系保持紧密和稳定。RMSD、RMS、Rg 氢键数量变化曲线图见图 5。

以豆甾醇-PTGS2 复合体为例, 模拟时间为 100 ns。RMSF 结果显示, 豆甾醇、芦荟大黄素与 PTGS2 分子模拟先上升后下降并趋于稳定, PTGS2 的大部分氨基酸残基的波动幅度较小, 仅有个别回旋区域的残基波动较大, 但不影响整体结构稳定性。RMSD 值在模拟初期迅速上升后逐渐趋于平稳, 波动范围在 2 nm 左右, 表明复合体结构在模拟过程中整体保持稳定。计算得到的结合自由能也进一步证实了豆甾醇与 PTGS2 之间具有较强的结合能力, 复合体在生理环境下能够稳定存在。

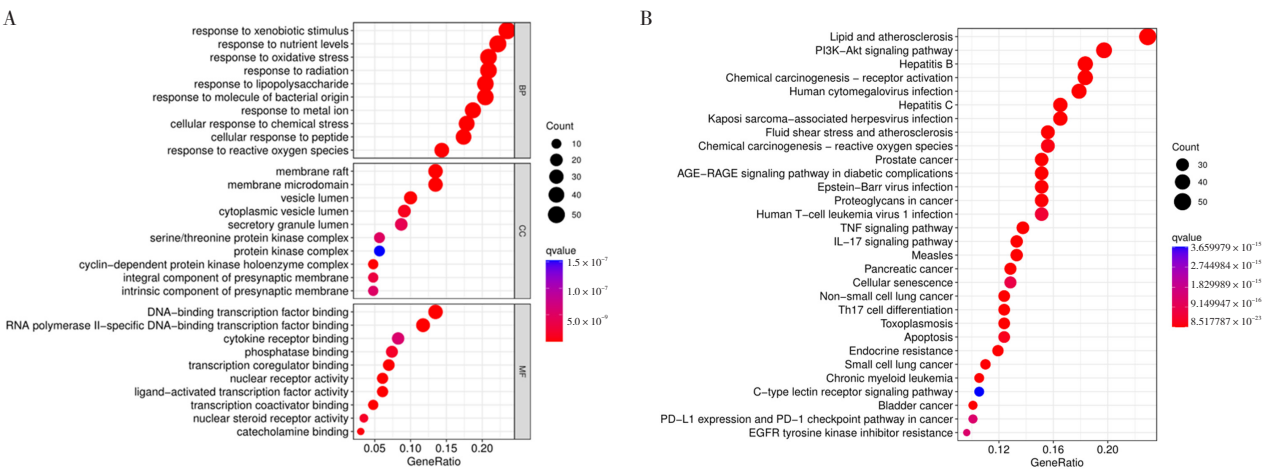


图3 GO功能与KEGG富集分析
Figure 3. GO function and KEGG enrichment analysis

注: A. GO功能富集分析; B. KEGG信号通路富集分析。

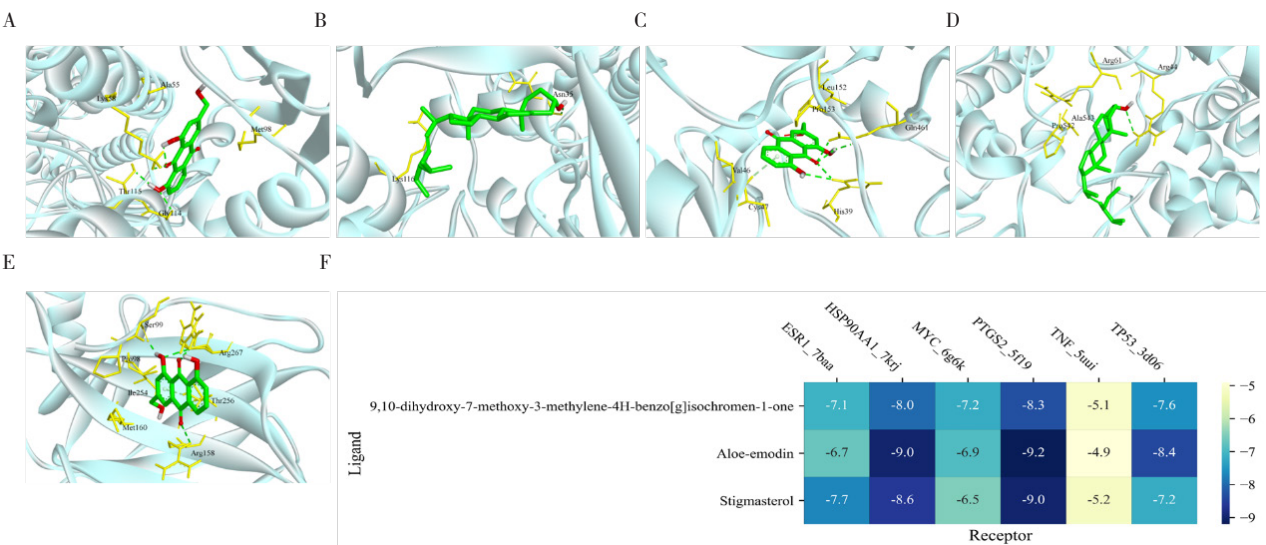


图4 分子对接部分结果及热图
Figure 4. Molecular docking results and heatmap

注: A和B. HSP90AA1与芦荟大黄素、豆甾醇分子对接结果展示; C和D. 为PTGS2与芦荟大黄素、豆甾醇分子对接结果展示; E. TP53与芦荟大黄素对接结果展示; F. 芦荟大黄素、豆甾醇与核心靶点对接热图。

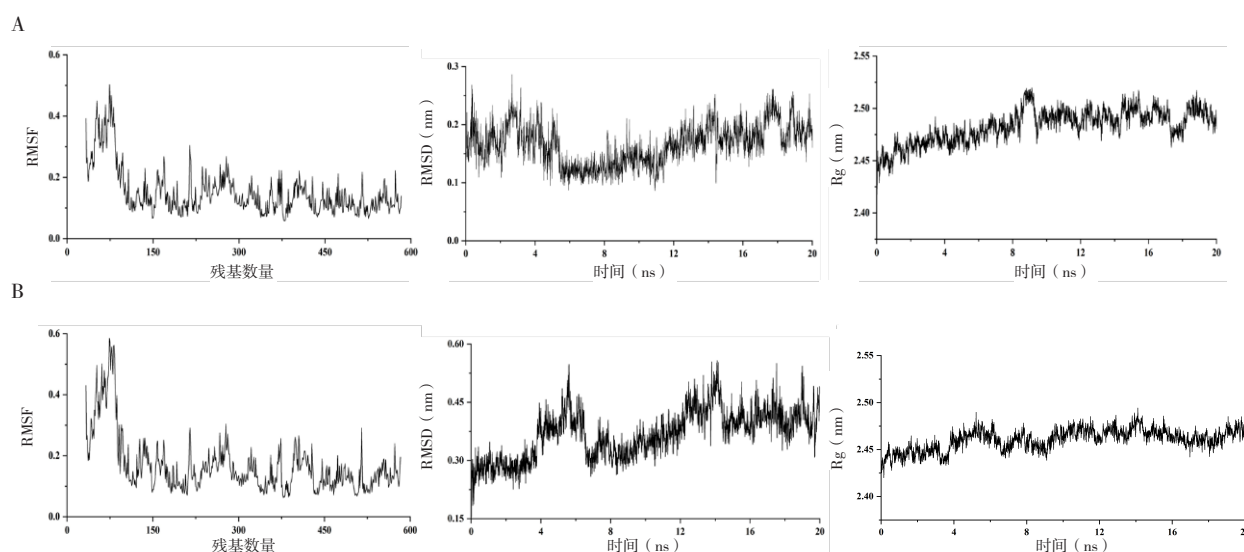


图5 分子动力学模拟曲线

Figure 5. Molecular dynamics simulation curve

注：A. 豆甾醇与PTGS2分子模拟；B. 芦荟大黄素与PTGS2分子模拟。

3 讨论

本研究通过数据库筛选及靶点预测，发现决明子含有 14 种活性成分，作用于包括 TNF、PTGS2、TP53 在内的 48 个共同靶点。这些靶点广泛涉及炎症、细胞凋亡、氧化应激及神经内分泌调节，说明决明子的治疗机制具有多层面、多途径的复杂性^[10]。PPI 网络证实了其作用的多靶性和复杂性，结果与既往一致，中药常通过多靶多路协同发挥疗效^[11]。成分-靶点-疾病网络图揭示了活性成分与关键靶点间复杂的关系，芦荟大黄素、豆甾醇、决明素等成分和 TNF、PTGS2 等靶点在网络中具有较高的介数和接近中心性，提示它们在调控治疗中起关键作用。这些成分可能通过调节核心靶点，影响相关信号通路，实现改善便秘的效果^[12]。

GO 功能富集分析显示，决明子主要调控对异物和环境刺激的反应，这可能通过改善肠道微环境、减轻炎症、增强肠道通透性等机制发挥作用。细胞组成分析表明，其作用靶点多集中于突触膜和突触后膜，提示其可能影响肠神经网络的功能，调节肠道蠕动和排便反射，这与张梦琪^[13]研究结论一致，决明子可通过调节肠道神经功能改善慢传输型便秘。分子功能富集分析结果表明，DNA 结合转录因子和 RNA 聚合酶 II 的结合活动也被显著富集，暗示其可能调控基因表达，从而影响蛋白质的合成。KEGG 信号通路富集分

析揭示了多条与便秘密切相关的信号通路，包括神经退行性疾病、脂质代谢、PI3K-Akt 通路等，这些路径与肠道神经功能障碍、炎症和氧化应激有关^[14]。此外，研究发现肠道菌群变化也在便秘发生中起重要作用，决明子可能通过调节菌群结构，间接调控这些信号通路，与 Gao 等^[14]报道的决明子成分通过调节肠道菌群缓解便秘的结论相符。

分子对接结果显示，芦荟大黄素和豆甾醇等成分能与 HSP90AA1、PTGS2、TNF、TP53 等靶点蛋白形成较好结合，具有低结合能，显示出较强的亲和力。芦荟大黄素作为决明子中 OB 值最高的蒽醌类成分，其羟基可以通过氢键和疏水作用与活性位点结合，抑制靶点蛋白活性，发挥治疗作用，与袁有才等^[4]报道的决明子蒽醌类成分是其润肠通便的核心物质基础一致。分子动力学模拟进一步验证了豆甾醇和芦荟大黄素与 PTGS2 结合的稳定性，RMSD、RMSF 和 Rg 曲线均表明其在模拟过程中保持稳态，说明其在生理环境下具有较强的结合稳定性。结合自由能的计算也支持了这一结论，显示这些成分在体内具有潜在的药理作用。

本研究也存在一定局限性：研究主要基于计算预测，缺乏体内外实验验证。针对这一问题，未来将通过 PCR 技术检测便秘模型动物肠道组织中 HSP90AA1、PTGS2、TNF 等核心靶点的 mRNA 表达水平，验证决明子活性成分对这些靶

点的调控作用,进一步确证作用机制。同时,数据库信息的完整性也可能影响预测结果,后续将结合超高效液相色谱-串联质谱等技术鉴定决明子体内实际作用成分,完善研究数据。

综上所述,决明子多成分、多靶点、多途径的抗便秘机制,主要通过其核心成分芦荟大黄素、豆甾醇靶向 TNF、PTGS2 等靶点干预炎症反应和神经调节。

参考文献

- 1 周胖,孙娴. 中医外治法治疗功能性便秘的研究进展[J]. 江苏中医药, 2025, 57(3): 74–78. [Zhou X, Sun X. Research progress on the treatment of functional constipation with traditional Chinese medicine external therapies[J]. Jiangsu Journal of Traditional Chinese Medicine, 2025, 57(3): 74–78.] DOI: [10.19844/j.cnki.1672-397X.2025.03.020](https://doi.org/10.19844/j.cnki.1672-397X.2025.03.020).
- 2 梁勇,张洋,石宇,等. 大黄治疗便秘的研究进展[J/OL]. 中华中医药学刊, 2025–03–18. [Liang Y, Zhang Y, Shi Y, et al. Research progress of rhubarb in the treatment of constipation[J]. Chinese Archives of Traditional Chinese Medicine, 2025–03–18.] <https://link.cnki.net/urlid/21.1546.r.20250317.1750.016>.
- 3 Ali MY, Park S, Chang M. Phytochemistry, ethnopharmacological uses, biological activities, and therapeutic applications of cassia obtusifolia L.: a comprehensive review[J]. Molecules, 2021, 26(20): 6252. DOI: [10.3390/molecules26206252](https://doi.org/10.3390/molecules26206252).
- 4 袁有才,李力恒,李岩,等. 决明子化学成分及药理作用研究进展[J]. 辽宁中医药大学学报, 2025, 27(10): 199–208. [Yuan YC, Li LH, Li Y, et al. Research progress on the chemical constituents and pharmacological effects of Juemingzi (Cassia Semen)[J]. Journal of Liaoning University of Traditional Chinese Medicine, 2025, 27(10): 199–208.] DOI: [10.13194/j.issn.1673-842X.2025.10.034](https://doi.org/10.13194/j.issn.1673-842X.2025.10.034).
- 5 郑霞,靖博宇,李秋华,等. 基于中药系统药理学数据库分析平台(TCMSP)分析巴戟天的有效化学成分及临床应用[J]. 实用中医内科杂志, 2021, 35(5): 72–76. [Zheng X, Jing BY, Li QH, et al. Analysis of effective chemical constituents and clinical application of morinda officinalis based on TCMSP database[J]. Journal of Practical Traditional Chinese Internal Medicine, 2021, 35(5): 72–76.] DOI: [10.13729/j.issn.1671-7813.Z20210603](https://doi.org/10.13729/j.issn.1671-7813.Z20210603).
- 6 Vithalkar MP, Sandra KS, Bharath HB, et al. Network pharmacology-driven therapeutic interventions for interstitial lung diseases using traditional medicines: a narrative review[J]. Int Immunopharmacol, 2025, 147: 113979. DOI: [10.1016/j.intimp.2024.113979](https://doi.org/10.1016/j.intimp.2024.113979).
- 7 王坤,刘洋,殷玥,等. 简化栀芩汤的抗炎药效物质基础及作用机制研究[J]. 药学报, 2024, 59(8): 2245–2254. [Wang K, Liu Y, Yin Y, et al. The material basis and mechanism of action of anti-inflammatory effects of simplified Zhiqin decoction[J]. Acta Pharmaceutica Sinica, 2024, 59(8): 2245–2254.] DOI: [10.16438/j.0513-4870.2023-0817](https://doi.org/10.16438/j.0513-4870.2023-0817).
- 8 Bisht A, Tewari D, Kumar S, et al. Network pharmacology, molecular docking, and molecular dynamics simulation to elucidate the mechanism of anti-aging action of Tinospora cordifolia[J]. Mol Divers, 2024, 28(3): 1743–1763. DOI: [10.1007/s11030-023-10684-w](https://doi.org/10.1007/s11030-023-10684-w).
- 9 Li N, Li C, Zheng A, et al. Ultra-high-performance liquid chromatography-mass spectrometry combined with molecular docking and molecular dynamics simulation reveals the source of bitterness in the traditional Chinese medicine formula Runchang-Tongbian[J]. Biomed Chromatogr, 2024, 38(8): e5929. DOI: [10.1002/bmc.5929](https://doi.org/10.1002/bmc.5929).
- 10 Gu S, Xue Y, Zhang Y, et al. An investigation of the mechanism of rapid relief of ulcerative colitis induced by five-flavor sophora flavescens enteric-coated capsules based on network pharmacology[J]. Comb Chem High Throughput Screen, 2020, 23(3): 239–252. DOI: [10.2174/1386207323666200302121711](https://doi.org/10.2174/1386207323666200302121711).
- 11 肖剑秋,谢忠罗,何炜,等. 基于网络药理学探讨大黄治疗儿童功能性便秘的作用机制研究[J]. 新中医, 2021, 53(23): 1–5. [Xiao JQ, Xie ZL, He W, et al. Study on the mechanism of rhubarb in the treatment of functional constipation in children based on network pharmacology[J]. Journal of New Chinese Medicine, 2021, 53(23): 1–5.] DOI: [10.13457/j.cnki.jncm.2021.23.001](https://doi.org/10.13457/j.cnki.jncm.2021.23.001).
- 12 Gao CC, Li GW, Wang TT, et al. Rhubarb extract relieves constipation by stimulating mucus production in the colon and altering the intestinal flora[J]. Biomed Pharmacother, 2021, 138: 111479. DOI: [10.1016/j.biopha.2021.111479](https://doi.org/10.1016/j.biopha.2021.111479).
- 13 张梦琪. 决明子颗粒剂的制备及其治疗慢传输型便秘作用与机制初步研究[D]. 安徽芜湖: 皖南医学院, 2023. DOI: [10.27374/d.cnki.gwnyy.2023.000422](https://doi.org/10.27374/d.cnki.gwnyy.2023.000422).
- 14 Gao CC, Li GW, Wang TT, et al. Rhubarb extract relieves constipation by stimulating mucus production in the colon and altering the intestinal flora[J]. Biomed Pharmacother, 2021, 138: 111479. DOI: [10.1016/j.biopha.2021.111479](https://doi.org/10.1016/j.biopha.2021.111479).

收稿日期: 2025 年 09 月 01 日 修回日期: 2025 年 12 月 02 日

本文编辑: 李 阳 钟巧妮