

鸡血藤治疗心血管疾病的生物信息学研究

邹晓素¹,吕晓慧²,赵湘培¹,孙宗喜^{1,2}

(1. 广西中医药大学附属国际壮医医院,广西南宁 530201;2. 广西中医药大学 研究生院,广西南宁 530200)

摘要:运用网络药理学及分子对接技术探讨鸡血藤治疗心血管疾病的作用机制。通过中药系统药理学数据库与分析平台(TCMSP)获取鸡血藤中的活性成分、药物靶点,在 DrugBank 和 OMIM 数据库寻找心血管疾病相关靶点。在此基础上,将鸡血藤作用靶点与心血管疾病靶点筛选得到鸡血藤治疗心血管疾病的潜在靶点。运用在线 String 数据库和 Cytoscape 软件构建蛋白相互作用(PPI)网络,运用 DAVID 平台对共同靶点进行 GO 分析和通路分析,使用 AutoDock vina 软件对入血成分与关键靶点进行虚拟对接。根据筛选条件[口服生物利用度(OB)和类药性(DL)]及查阅文献资料共得到 52 个化学成分、226 个潜在靶点,以“cardiovascular disease”为搜索条件共收集到 538 个疾病靶点,鸡血藤治疗心血管疾病可能涉及免疫系统、炎症过程和糖脂代谢等多种途径,鸡血藤中大多数化学成分与关键基因(即 NOS3、IL-6、VEGFA、MMP9 和 PPARG)的结合能值 < -5.0 kcal/mol。文中从网络药理学角度预测了鸡血藤治疗心血管疾病的作用机制,提示鸡血藤治疗心血管疾病具有多成分、多靶点和多途径的特点,为进一步研究其分子机制奠定了基础。

关键词:鸡血藤;心血管疾病;网络药理学;分子对接

中图分类号:R284.1 **文献标志码:**A **文章编号:**1672-8513(2024)03-0286-08

心血管疾病是一类主要发生在心脏和/或血管的疾病,包括冠心病、心力衰竭、心律失常、中风、静脉血栓栓塞和外周血管疾病等^[1]。近年来,有关心血管疾病防治研究取得了明显进展,但仍是全球第一大慢性疾病。目前,西药是治疗心血管疾病的主流药物,包括硝酸盐、他汀类药物、 β -受体阻断剂,但往往伴有干咳、胃肠道出血和肾功能衰竭等不良反应^[2]。中医药注重整体观念和辨证论治,在心血管疾病防治方面有独特优势。

鸡血藤,又名血藤、血风藤、三叶鸡血藤,为豆科植物密花豆 *Spatholobus suberectus* Dunn 的干燥藤茎,为“桂十味”道地药材之一,具有补血活血、调经止痛、舒筋活络之功效,能“去瘀血,生新血”,被称为“血分之圣药”。鸡血藤主要含有黄酮、酚酸、甾醇、萜类、木脂素、蒽醌等成分,具有改善造血系统、

抗血栓、降血脂、降血压、抗肿瘤、调节免疫等生物活性^[3]。目前,有研究部分解析了鸡血藤的化学成分及其起效机制^[4-5],但从整体上解释其多组分如何协同发挥治疗心血管疾病的药理作用上不完全明晰。目前,基于常规实验方法具有耗时、成本高、效率低等缺点,也难以系统地表征中药“多成分、多靶点”的作用模式。作为一门新兴交叉学科,网络药理学融合了系统生物学、多向药理学、计算机技术等方法,其系统整体的概念与中药“多成分-多靶点-多通路”研究思路不谋而合,已成为揭示中药与疾病之间复杂网络关系的有效工具^[6]。因此,本研究拟借助网络药理学和分子对接技术研究鸡血藤的主要活性成分,并对其治疗心血管疾病的作用靶点及信号通路进行分析,为后续的实验验证和临床应用提供参考。

收稿日期:2022-06-25。

基金项目:全国中药特色技术传承人才培养项目(国中医药人教函[2023]96号);广西国际壮医医院高层次人才队伍建设三年行动计划项目(GZCX20231204);全国名中医黄汉儒学术思想及临床经验传承推广中心(2022V004)。

作者简介:邹晓素(1994-),女,硕士。主要从事中药民族药药效及作用机制相关研究。

通信作者:孙宗喜(1978-),男,高级工程师。主要从事中药民族药药效及作用机制相关研究。

1 方法

1.1 鸡血藤活性成分收集及潜在靶点预测

从中药系统药理学数据库和分析平台(TCMSP)数据库中检索鸡血藤的所有化学成分,设置口服生物利用度(OB)≥30%和类药性(DL)≥0.18作为条件进行筛选,并结合文献进行补充,构建化学成分库。选择TCMSP和STITCH数据库,获取鸡血藤活性成分对应的潜在作用靶点信息,将其上传至UniProt蛋白质数据库,限定物种为人,获得作用靶点标准名称。

1.2 心血管疾病靶点的筛选

通过DrugBank数据库和在线人类孟德尔遗传数据库(OMIM)进行检索,以“cardiovascular disease”为关键词,获得心血管疾病相关的疾病靶点。

1.3 活性成分-靶点-疾病网络构建

为明确疾病相关靶点与鸡血藤化学成分潜在靶点之间的相互作用,将两者靶点取交集,输入Venny 2.1软件绘制韦恩图,并将其导入Cytoscape 3.7.2软件构建“鸡血藤-共有靶点-疾病(心血管疾病)”网络。

1.4 蛋白相互作用(PPI)网络构建

为了更好地分析靶蛋白之间的相互作用,将获取的鸡血藤治疗心血管疾病的潜在作用靶点导入STRING数据平台,限定物种为人,选择置信度≥0.4,导入Cytoscape 3.7.0软件构建PPI网络。

1.5 GO富集分析与KEGG通路分析

将潜在靶点导入Davidv6.7在线分析平台,i-

dentifier设置为official gene symbol,list type设置为gene list,物种设置为人,进行GO富集分析和KEGG通路分析($p < 0.05$),并结合KEGG数据库和Reactome数据库进行通路注释分析。

1.6 关键基因分析

选用插件“CytoHubba”进一步分析PPI网络中节点的拓扑特性,筛选鸡血藤治疗心血管疾病的的关键基因,利用DisGeNET数据库基因名称检索功能,获取关键基因的蛋白属性(protein class),并利用STRING网站分析关键基因相互作用。

1.7 分子对接

使用Autodock Vina 1.1.2软件进行分子对接,分析预测关键基因的可信度。在PubChem数据库重检索鸡血藤活性成分的结构,并采用OpenBabel 2.4.1软件构建3D结构,然后使用PDB数据库获取关键基因的3D结构,采用分子对接技术评估鸡血藤活性成分和关键基因的结合亲和力。

2 结果与分析

2.1 活性成分筛选及其潜在靶点

经筛选,纳入研究的鸡血藤主要活性成分有52个,其中TCMSP数据库中满足“OB≥30%和DL≥0.18”条件有49个,检索文献收集到有活性的成分3个(hesperetin,epigallocatechin和eriodictyol)^[7],见表1。运用TCMSP和STITCH数据库进行靶点预测,去重后筛选出226个潜在靶点。

表1 鸡血藤的主要活性成分

Mol ID	化合物	OB/%	DL
000295	alexandrin	20.63	0.63
000296	hederagenin	36.91	0.75
000033	(3S,8S,9S,10R,13R,14S,17R)-10,13-dimethyl-17-[(2R,5S)-5-propan-2-yl]octan-2-yl]-2,3,4,7,8,9,11,12,14,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-3-ol	36.23	0.78
000359	β -sitosterol	36.91	0.75
000390	daidzein	19.44	0.19
000391	ononin	11.52	0.78
000392	formononetin	69.67	0.21
000417	calycosin	47.75	0.24
000449	stigmasterol	43.83	0.76
000461	3,7-dihydroxy-6-methoxy-dihydroflavonol	43.8	0.26
000462	3-O-(6-O-methyl- β -D-glucuronopyranosyl)methyl asiatate	20.34	0.28
000463	epifriedelanol	27.34	0.76
000465	hydroxysitosterol	13.34	0.78
000466	6,8-di-C- α -L-arabinosylapigenin	21.6	0.85
000467	castanin	23.54	0.27
000468	8-O-methylreyusi	70.32	0.27

续表 1

Mol ID	化合物	OB/%	DL
000469	3 - hydroxystigmast - 5 - en - 7 - one	40.93	0.78
000470	8 - C - α - L - arabinosylluteolin	35.54	0.66
000471	aloe - emodin	83.38	0.24
000472	emodin	24.4	0.24
000476	physcion	22.29	0.27
000480	genistin	13.35	0.75
000481	genistein	17.93	0.21
000483	(Z) - 3 - (4 - hydroxy - 3 - methoxy - phenyl) - N - [2 - (4 - hydroxyphenyl) ethyl] acrylamide	118.35	0.26
000486	prunetin	5.41	0.24
000487	schisandrin	8.3	0.55
000488	schizandrol	9.1	0.78
000490	petunidin	30.05	0.31
000491	augelicin	37.5	0.66
000492	catechin	54.83	0.24
000493	campesterol	37.58	0.71
000494	5 - [(3R) - 7 - hydroxychroman - 3 - yl] - 2,3 - dimethoxy - p - benzoquinone	19.20	0.30
000495	odoratin	7.83	0.29
000496	delphinidin - 3 - glucoside	16.27	0.78
000497	licochalcone a	40.79	0.29
000498	isoorientin	23.30	0.76
000499	malvidin	2.48	0.34
000500	vestitol	74.66	0.21
000501	consume close grain	68.12	0.27
000502	cajinin	68.8	0.27
000503	medicagol	57.49	0.6
000504	kadsurin	25.22	0.84
000505	interiorin	7.5	0.82
000506	lupinidine	61.89	0.21
000507	psi - baptigenin	70.12	0.31
000508	friedelin	29.16	0.76
000509	isosativan	8.24	0.24
000510	olmelin	25.21	0.24
000006	luteolin	36.16	0.25
002341	hesperetin	70.31	0.27
006791	epigallocatechin	24.18	0.27
005190	eriodictyol	71.79	0.24

2.2 心血管疾病靶点

通过检索 DrugBank 和 OMIM 数据库,分别获得了 76 个和 474 个治疗心血管疾病的靶点,去重后共获得疾病靶点 538 个。

2.3 成分 - 靶点 - 疾病网络构建

将鸡血藤活性成分靶点与心血管疾病靶点输入到 Venn 软件绘制韦恩图,两者取交集后获得疾病 - 药物成分共有靶点 54 个(图 1)。同时,构建了“活性成分 - 靶点 - 疾病”网络(图 2),表明鸡血藤通过

多成分作用于多靶点发挥治疗心血管疾病的作用。

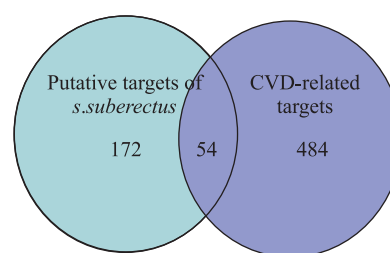
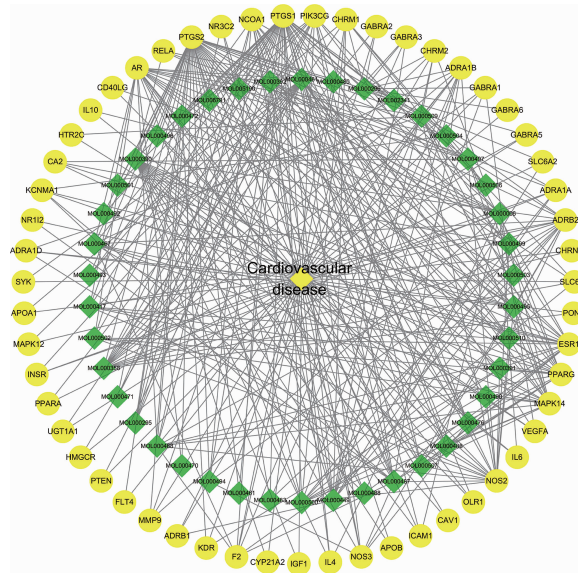


图 1 鸡血藤成分靶点 - 疾病靶点维恩图



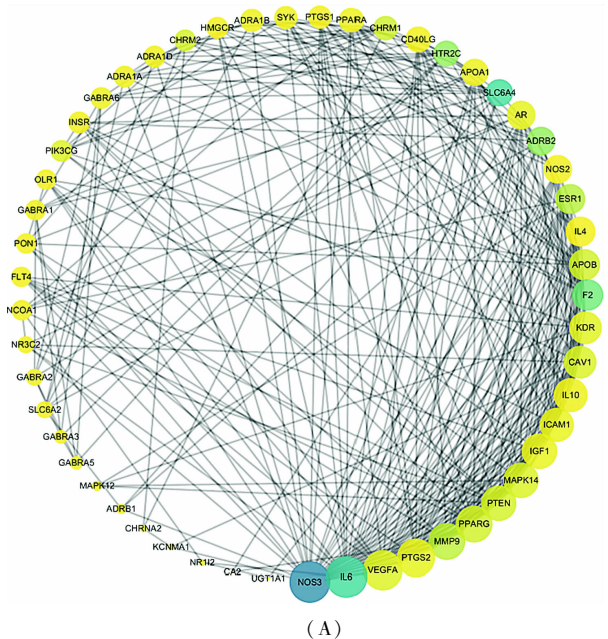
绿色菱形代表活性成分 黄色圆圈代表靶点 黄色菱形代表心血管疾病

图 2 “生物活性成分 - 靶点 - 疾病”网络

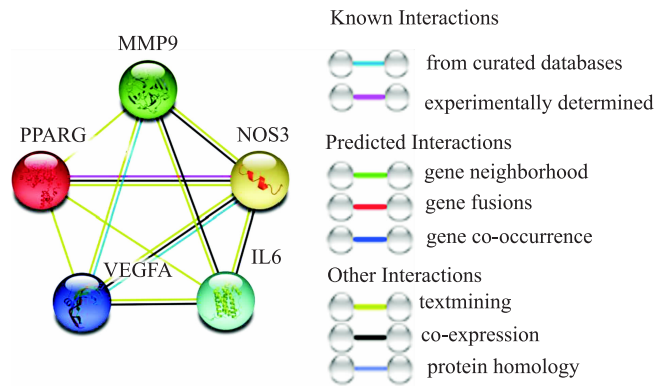
2.4 PPI 网络和关键基因分析

将以上获得的 54 个共有靶点输入在线 STRING 网站,物种设置为“人”,构建 PPI 网络. 通过平台分析得到:节点数 37 个,边数 312 条,平均节点度值 11.8,见图 3A. 根据“度值”和“介数”大于中位数原则筛选出关键基因,其中排序前 5 的靶基因包括一氧化氮合酶 3 (NOS3)、白细胞介素 6 (IL-6)、血管

内皮生长因子 A (VEGFA)、基质金属肽酶 9 (MMP9) 和过氧化物酶体增殖物激活受体 γ (PPARG),通过 DisGeNET 数据库确定相应的蛋白类别(见表 2). 基于 STRING 数据库构建关键基因相互作用网络,结果表明这 5 个关键基因以已知、预测或其他相互作用而相互影响(图 3B).



(A)



(B)

(A) 圆形节点大小表示度值大小,颜色由深到黄按介数大小排序

图 3 鸡血藤、心血管疾病交集靶点的 PPI 网络(A)及排名前 5 的关键基因(B)

表 2 鸡血藤治疗心血管疾病的关键基因

基因名	Uniprot ID	靶基因	靶基因属性	度值	介数
NOS3	P29474	一氧化氮合酶 3	无	30	0.188
IL-6	P05231	白介素-6	无	30	0.130
VEGFA	P15692	血管内皮生长因子 A	信号分子	23	0.022
MMP9	P14780	基质金属蛋白酶 9	水解酶,蛋白酶	21	0.039
PPARG	P37231	过氧化物酶体增殖物激活受体 γ	核酸结合,受体,转录因子	21	0.029

2.5 GO 功能富集和 KEGG 通路分析

为进一步阐明 54 个共有靶点的可能作用,通过在线 DAVID 网站对鸡血藤治疗心血管疾病的潜在靶点进行 GO 功能富集和 KEGG 通路分析. 如图 4A 所示,在排名前 20 的 GO 条目中,包括血液循环 (blood circulation)、循环系统 (the circulatory system)、多细胞生物过程的负调控 (negative regulation of the multicellular organismal process)、细胞对类固醇激素刺激的反应 (the cellular response to steroid hormone stimulus,)、系统过程调节 (system process

regulation)、血压调节 (blood pressure regulation) 等. 如图 4B 所示,排名前 20 的信号通路可分为多个类别,其中有 5 条与心血管系统有关,分别是 VEGF、platelet activation、cGMP - PKG、fluid shear stress and atherosclerosis 和 adrenergic signaling in cardiomyocytes 信号通路;有 3 条与炎症过程和免疫系统有关,分别是 IL-17、HIF-1 和 TNF 信号通路;有 2 条与糖脂代谢有关,分别是 regulation of lipolysis in adipocytes and FoxO 信号通路. 因此,提示鸡血藤治疗心血管疾病通过多靶点、多通路发挥作用.

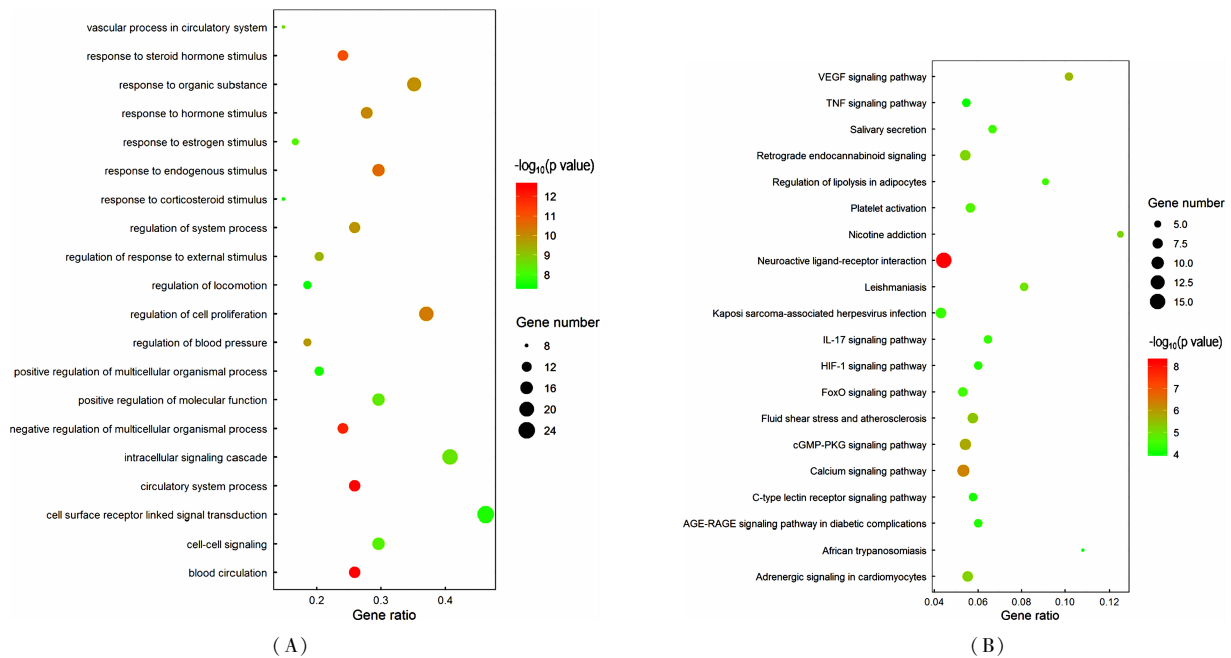


图 3 鸡血藤干预心血管疾病涉及的生物学过程分析 (A) 和 KEGG 通路富集分析 (B) 散点图

2.6 分子对接验证

采用分子对接技术验证鸡血藤生物活性成分与关键基因之间的相互作用. 如图 5 所示,大多数活性成分与关键基因的潜在结合能值表明鸡血藤具有治疗心血管疾病良好的潜在能力. 如图 6 所示,大豆苷元 (daidzein) 对 MMP9 (结合能 = -10.6 kcal/mol) 具

有最强大的结合力,芒柄花黄素 (formononetin) 对 NOS3 (结合能 = -7.9 kcal/mol) 和 VEGFA (结合能 = -8.6 kcal/mol) 以及芒柄花苷 (ononin) 对 PPARG (结合能 = -8.2 kcal/mol) 也存在较强的结合力,毛蕊异黄酮 (calycosin) 对 IL-6 (结合能 = -5.3 kcal/mol) 有一定结合力.

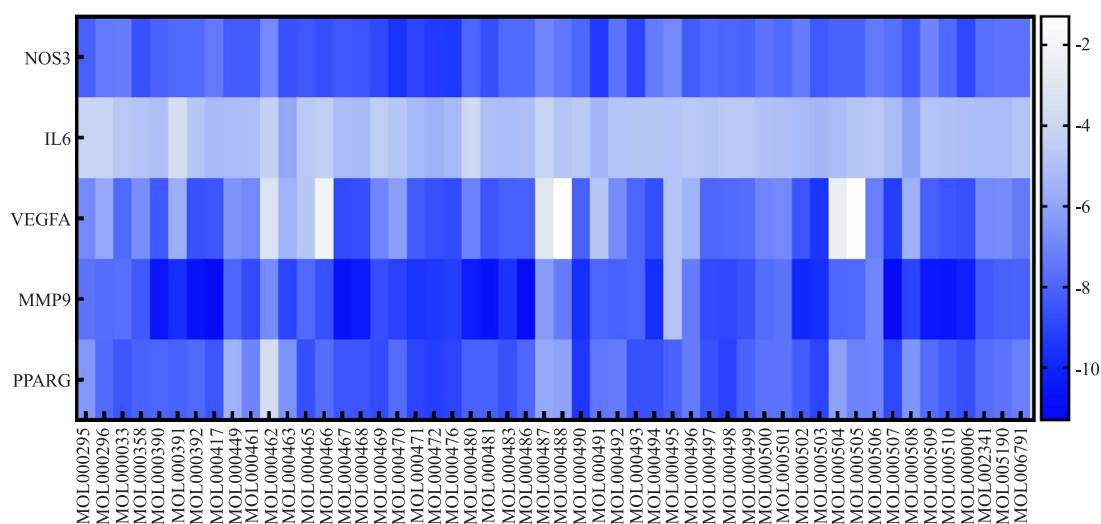


图 4 鸡血藤化学成分与 5 个关键基因 (NOS3、IL -6、VEGFA、MMP9、PPARG) 分子对接打分

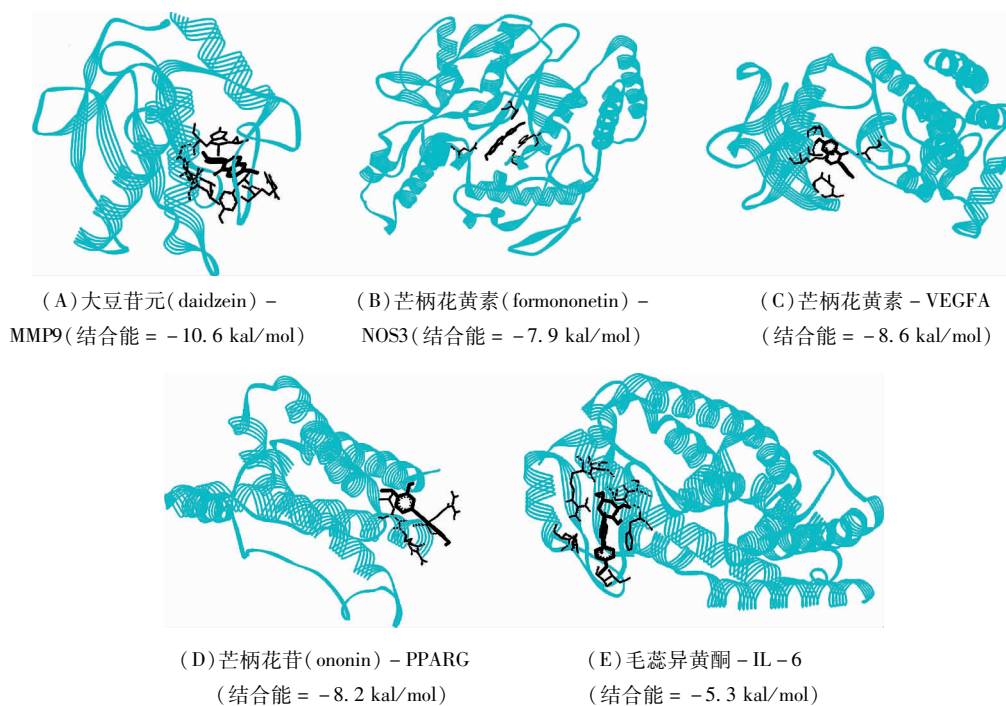


图 5 鸡血藤生物活性成分与关键基因之间分子对接示意图

3 讨论与结语

本研究采用网络药理学初步探索了鸡血藤治疗心血管疾病的分子机制. 中药单一成分可作用于多个靶点, 而多个成分亦可作用于同一靶点, 具有多靶点的活性成分往往比单靶点成分获得更好的临床疗效^[8]. 作为广西道地药材, 鸡血藤中的黄酮类成分是其防治心血管疾病的有效组分群. 本研究中, “活性成分 - 靶点 - 疾病” 网络表明大豆苷元、金雀异黄酮、芒柄花黄素、芒柄花苷和毛蕊异黄酮均可作用

于多个靶点. 有研究显示, 大豆苷元可降低低密度脂蛋白胆固醇、抑制血小板聚集、诱导一氧化氮 (NO) 产生和改善血管反应性^[9]. 金雀异黄酮在体外以 NO 依赖性方式松弛大鼠动脉, 增强粥样硬化动脉对乙酰胆碱的扩张反应^[10]. 芒柄花黄素通过抑制 ROS - TXNIP - NLRP3 通路能够减轻大鼠心肌缺血/再灌注损伤^[11]. 炎症是心血管事件的重要危险因素, 而芒柄花素及其糖苷 (芒柄花苷) 在 MAPK 通路中表现出抑制炎症的作用^[12]. 毛蕊异黄酮对预收缩大鼠胸主动脉血管环具有一定的舒张作用^[13].

根据 GO 注释和 KEGG 分析结果,大多数富集通路与心血管保护、炎症和免疫以及脂质代谢有关,提示鸡血藤通过多途径发挥治疗心血管病的作用。血小板活化途径在血小板止血和血栓形成的功能中有重要作用^[14]。本研究中,KEGG 通路分析中高度富集了血小板活化通路,表明鸡血藤可能通过该信号通路治疗心血管疾病。Lee 等^[15]报道了鸡血藤能够显著抑制由 ADP 和胶原诱导的血小板聚集,并能够抑制纤维蛋白原与 GP II b/III a 受体结合,抑制血栓素 A2 形成。因此,本文预测结果与既往实验研究结果一致。

通过网络拓扑分析筛选出鸡血藤作用于心血管疾病的前 5 个基因为关键基因,即 NOS3、IL-6、VEGFA、MMP9 和 PPARG。其中,NOS3 能催化血管内皮 NO 的生成,并在调节血管张力、白细胞粘附、血小板聚集等方面发挥重要作用^[16]。IL-6 是一种由多种组织(包括活化的巨噬细胞和内皮细胞和平滑肌细胞)产生的促炎细胞因子,促进其他细胞因子和单核细胞趋化蛋白 1 的分泌,加速心血管疾病进展^[17]。VEGFA 是一种血管通透性的关键调节因子,通过促进内皮细胞生长、迁移和有丝分裂在血管新生和血管发生中起到关键作用^[18]。在之前的一项研究中,MMP9 被证明可以降解细胞外基质中的各种蛋白质,在动脉粥样硬化斑块中过度表达,导致斑块破裂^[19]。此外,MMP9 可通过调节 VEGF 信号轴放大大局血管生成。PPARG 参与调节与脂肪细胞生成和脂肪形成、炎症和动脉粥样硬化等基因表达^[20]。

分子对接方法已成为计算机辅助药物研究领域的一项重要技术。它根据小分子配体和生物大分子受体的结合能大小提供活性化合物的排名。Gaillard 等^[21]认为结合能低于 -5.0 kcal/mol 时,表明候选化合物对特定靶点存在良好的结合亲和力。本研究中,鸡血藤中多数生物活性成分对 5 个关键基因表现出较高的结合力。推测这些关键基因的活性口袋可能被鸡血藤中活性成分所占据,从而调节其生物学功能。

综上,本研究通过生物信息学手段开展了鸡血藤抗心血管疾病的初步预测,认为鸡血藤中多成分通过同时影响多靶点发挥治疗心血管疾病的作用,从而在多个生物学途径发挥协同效应。本文为鸡血藤治疗心血管疾病的多维分子机制奠定了一定的研究基础,但是其结果准确性仍需要进一步通过体内外实验予以证实。

参考文献:

- [1] WESSLER B S, LAI Y, KRAMER W, et al. Clinical prediction models for cardiovascular disease: tufts predictive analytics and comparative effectiveness clinical prediction model database[J]. *Circ Cardiovasc Qual Outcomes*, 2015, 8:368-375.
- [2] TORPET L A, KRAGELUND C, REIBEL J, et al. Oral adverse drug reactions to cardiovascular drugs[J]. *Crit Rev Oral Biol Med*, 2004, 15:28-46.
- [3] 高志杰, 朱彤彤, 牛新茹, 等. 鸡血藤化学成分及药理活性研究进展[J/OL]. *辽宁中医药大学学报*, 2022, 24(4):37-74.
- [4] WANG Z Y, WANG D M, LOO T Y, et al. *Spatholobus suberectus* inhibits cancer cell growth by inducing apoptosis and arresting cell cycle at G2/M checkpoint[J]. *J Ethnopharmacol*, 2011, 133:751-758.
- [5] ZHAO P, ALAM M B, LEE S H, et al. *Spatholobus suberectus* exhibits antidiabetic activity in vitro and in vivo through activation of AKT-AMPK pathway[J]. *Evidence-Based Complement Altern Med*, 2017, 2017:6091923.
- [6] YU G H, LUO Z Q, ZHOU Y T, et al. Uncovering the pharmacological mechanism of *Carthamus tinctorius* L. on cardiovascular disease by a systems pharmacology approach[J]. *Biomed Pharmacother*, 2019, 117:109094.
- [7] QIN S S, ZHU Y X, WEI K H, et al. Study on herbal textual evolution and flavonoids and their pharmacological of *Spatholobi caulis* [J]. *Chinese Herb Med*, 2018, 43:2216-2223.
- [8] LI X K, YANG H J, XIAO J C, et al. Network pharmacology based investigation into the bioactive compounds and molecular mechanisms of *Schisandrae Chinensis Fructus* against drug-induced liver injury[J]. *Bioorg Chem*, 2020, 96:103553.
- [9] GAO Y, GU W W, CHEN L L, et al. The role of daidzein-loaded sterically stabilized solid lipid nanoparticles in therapy for cardio-cerebrovascular diseases[J]. *Biomaterials*, 2008, 29:4129-4136.
- [10] ALTAVILLA D, CRISAFULLI A, MARINI H, et al. Cardiovascular effects of the phytoestrogen genistein[J]. *Curr Med Chem Cardiovasc Hematol Agents*, 2004, 2:179-186.
- [11] WANG D S, YAN L Y, YANG D Z, et al. Formononetin ameliorates myocardial ischemia/reperfusion injury in rats by suppressing the ROS-TXNIP-NLRP3 pathway[J]. *Biochem Biophys Res Commun*, 2020, 525:759-766.
- [12] LUO L Y, ZHOU J Y, ZHAO H Y, et al. The anti-inflammatory effects of formononetin and ononin on lipopolysaccharide-induced zebrafish models based on lipidomics and targeted transcriptomics [J]. *Metabolomics*,

- 2019,15;153.
- [13] WU X, WANG Y, CHENG J, et al. Calcium channel blocking activity of calycosin, a major active component of *As-tragali Radix*, on rat aorta [J]. *Acta Pharmacol Sin*, 2006 27;1007 – 1012.
- [14] ESTEVEZ B, DU X. New concepts and mechanisms of platelet activation signaling [J]. *Physiology*, 2017, 32:162 – 177.
- [15] LEE B J, JO I Y, BU Y, et al. Antiplatelet effects of *Spatholobus suberectus* via inhibition of the glycoprotein IIb/IIIa receptor [J]. *J Ethnopharmacol*, 2011, 134:460 – 467.
- [16] ZHOU S, MU G Y, WEI S P, et al. Associations between polymorphisms of endothelial nitric oxide synthase, matrix metalloproteinase 3, angiotensinogen, and angiotensin II type I receptor and risk of restenosis after percutaneous coronary intervention: a meta – analysis [J]. *Clin Ther*, 2020, 42:458 – 474.
- [17] ZHANG B, LI X L, ZHAO C R, et al. Interleukin – 6 as a predictor of the risk of cardiovascular disease: a meta – analysis of prospective epidemiological studies [J]. *Immunol. Invest*, 2018, 47:689 – 699.
- [18] BATES D O. Vascular endothelial growth factors and vascular permeability [J]. *Cardiovasc Res*, 2010, 87: 262 – 271.
- [19] ZHI H, WANG H, REN L Q, et al. Functional polymorphisms of matrix metalloproteinase – 9 and risk of coronary artery disease in a Chinese population [J]. *Mol Biol Rep*, 2010, 37:13 – 20.
- [20] LI H B, LI X, HUO C J, et al. TLR4/MyD88/NF – κ B signaling and PPAR – γ within the paraventricular nucleus are involved in the effects of telmisartan in hypertension [J]. *Toxicol Appl Pharm*, 2016, 305:93 – 102.
- [21] GAILLARD T. Evaluation of AutoDock and AutoDock Vina on the CASF – 2013 benchmark [J]. *J Chem Inf Model*, 2018, 58:1697 – 1706.

Uncovering the mechanism of *Spatholobus suberectus* for the treatment of cardiovascular disease based on network pharmacology and molecular docking technology

ZOU Xiao-su¹, LÜ Xiao-hui², ZHAO Xiang-pei¹, SUN Zong-xi^{1,2}

(1. Guangxi International Zhuang Medicine Hospital Affiliated to Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530201, China; 2. Graduate School of Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530200, China)

Abstract: This study is to explore the pharmacological mechanisms of *Spatholobus suberectus* Dunn (*S. suberectus*) in the treatment of cardiovascular disease using network pharmacology and molecular docking technology. The active ingredients and drug targets in *S. suberectus* were collected from the Traditional Chinese Medicine System Pharmacology Database and Analysis Platform (TCMSP). The cardiovascular disease-related targets were obtained from the DrugBank and OMIM databases. Further, the targets of *S. suberectus* and the targets of cardiovascular diseases were screened out to obtain the potential targets of *S. suberectus* for treating cardiovascular diseases. A protein interaction (PPI) network was constructed using the online String database and Cytoscape software. The DAVID platform was used to perform GO analysis and pathway analysis on the overlapping targets, and AutoDock vina software was used to perform molecular docking between the bio-active components and hub targets. According to the screening criteria of oral bioavailability (OB) and drug-like activity (DL) and literature review, a total of 52 chemical components and 226 potential targets were obtained, and 538 disease targets were collected using “cardiovascular disease” as the search keyword. The treatment of *S. suberectus* for cardiovascular diseases may involve multiple pathways such as the immune system, inflammatory process and glucose and lipid metabolism. Binding energy value of the majority of components in *S. suberectus* and the hub genes (i. e. NOS3, IL-6, VEGFA, MMP9, and PPARG) was less than –5.0 kcal/mol. This study indicated that *S. suberectus* in treating cardiovascular disease had the characteristics of multiple ingredients, multiple targets and multiple pathways, which laid a foundation for further research.

Key words: *Spatholobus suberectus* Dunn; cardiovascular disease; network pharmacology; molecular docking

(责任编辑 王琳)