

基于网络药理学和分子对接探讨鸡骨草治疗金黄色葡萄球菌所致皮肤感染的作用机制

黄小苑¹, 张 杰^{2,3}, 季炫烨¹, 张雪晴¹, 骆 彤¹, 张达培^{3,4}, 唐海波^{2,3,5*}, 徐子恒^{3,4*}

1. 广西中医药大学 赛恩斯新医药学院, 广西 南宁 530222
2. 广西中医药大学 中医药壮瑶医药研究院, 广西 南宁 530200
3. 广西高发传染病中西医结合转化医学重点实验室, 广西 南宁 530200
4. 广西中医药大学 公共卫生与管理学院, 广西 南宁 530200
5. 广西中医药防治医学分子生物重点实验室, 广西 南宁 530024

摘要:目的 基于网络药理学和分子对接研究鸡骨草治疗金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染的作用机制。方法 通过 TCMSPP 数据库检索鸡骨草的活性成分及对应靶点; 利用 GeneCards、OMIM 数据库检索金黄色葡萄球菌所致皮肤感染的靶点; 通过韦恩图绘制平台获取鸡骨草治疗金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染共同的作用靶点, 将交集所得的共同靶点上传至线上软件 STRING, 构建蛋白相互作用 (PPI) 网络, 并筛选出关键活性成分和核心靶点; 基于核心作用靶点进行基因本体 (GO) 和京都基因与基因组百科全书 (KEGG) 富集分析; 通过 AutoDockTools 软件进行分子对接验证。结果 鸡骨草对应靶点 157 个, 皮肤感染靶点共 11 450 个, 金黄色葡萄球菌靶点共 2 429 个; PPI 网络分析获得鸡骨草治疗金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染的作用靶点 151 个; GO 及 KEGG 富集分析得出鸡骨草治疗金黄色葡萄球菌所致的皮肤感染主要通过脂质与动脉粥样硬化通路进行, 抑制促炎因子, 鸡骨草治疗金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染的作用机制主要与抗炎有关。分子对接结果显示, 鸡骨草中漆黄素、 β -谷甾醇和豆甾醇与 CASP3、CASP8、CASP9 具有一定的亲和力。结论 鸡骨草活性成分可作用于多条信号通路发挥治疗金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染的作用。

关键词: 鸡骨草; 金黄色葡萄球菌; 皮肤感染; 网络药理学; 分子对接; 漆黄素; β -谷甾醇; 豆甾醇

中图分类号: R285 文献标志码: A 文章编号: 1674-5515(2025)04-0854-07

DOI: 10.7501/j.issn.1674-5515.2025.04.005

Mechanism of the *Abri Herba* in treating skin infection caused by *Staphylococcus aureus* based on network pharmacology and molecular docking technology

HUANG Xiaoyuan¹, ZHANG Jie^{2,3}, JI Xuanye¹, ZHANG Xueqing¹, LUO Tong¹, ZHANG Dapei^{3,4}, TANG Haibo^{2,3,5}, XU Ziheng^{3,4}

1. Faculty of Chinese Medicine Science, Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530222, China
2. Institute of Traditional Chinese and Zhuang-Yao Medicine, Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530200, China
3. Guangxi Key Laboratory of Translational Medicine for Treating High-Incidence Infectious Diseases with Integrative Medicine, Nanning 530200, China
4. School of Public Health and Management, Guangxi University of Chinese Medicine, Nanning 530200, China
5. Guangxi Health Commission Guangxi Key Laboratory of Molecular Biology of Preventive Medicine of Traditional Chinese Medicine, Nanning 530024, China

Abstract: Objective To study the mechanism of action of *Abri Herba* in the treatment of skin infection caused by *Staphylococcus aureus* based on network pharmacology and molecular docking technology. **Methods** The active ingredients and corresponding

收稿日期: 2025-02-14

基金项目: 广西中医药大学赛恩斯新医药学院大学生创新创业训练项目 (X202413643113, X202413643114); 广西中医药大学博士科研启动基金项目 (2022BS017); 广西中医药大学自然科学基金项目 (2023MS017); 广西中医药防治医学分子生物重点实验室开放课题 (GXHC-MBTCM-03); 广西人事厅青苗人才资金资助项目 (0502405906)

作者简介: 黄小苑, 女, 本科, 主要从事医学检验研究。E-mail: yuki11@qq.com

***通信作者:** 徐子恒, 博士, 讲师, 主要从事病原微生物耐药与药物防控研究。E-mail: gxuxzh2018@163.com
唐海波, 博士, 副研究员, 主要从事中药抗感染免疫研究。E-mail: tanghb@gxtcmu.edu.cn

targets of *Abri Herba* were collected from the TCMSP database. GeneCards and OMIM databases were used to search the disease targets of skin infection caused by *S. aureus*. The targets shared by *Abri Herba* and skin infection caused by *S. aureus* were obtained through the Venny diagram platform, and STRING online analysis platform to construct PPI networks, and screen out key active ingredients and core targets. Enrichment analysis of GO and KEGG based on the core target. AutoDockTools software was used to verify the molecular docking. **Results** *Abri Herba* has 157 corresponding targets, a total of 11 450 skin infection targets, and a total of 2 429 targets of *S. aureus*. PPI network analysis obtained 151 targets of *Abri Herba* in the treatment of skin infection caused by *S. aureus*. GO and KEGG shows that the treatment of skin infections caused by *S. aureus* is mainly carried out through the lipid and atherosclerosis pathway to inhibit pro-inflammatory factors. Therefore, the mechanism of action of *Abri Herba* in treatment of skin infections caused by *S. aureus* is mainly related to anti-inflammatory. Molecular docking results show that fisetin, stigmasterol, beta-sitosterol and CASP3, CASP8, CASP9 in *Abri Herba* has a certain affinity. **Conclusion** The active ingredients of *Abri Herba* can act on multiple signaling pathways to treat skin infections caused by *S. aureus*.

Key words: *Abri Herba*; *Staphylococcus aureus*; skin infection; network pharmacology; molecular docking; fisetin; stigmasterol; beta-sitosterol

鸡骨草是豆科植物广州相思子 *Abrus cantoniensis* Hance 的干燥全株，广泛分布于广西、广东等地，也是广西“桂十味”道地药材的一种，全年可采，一般于冬、春季挖取全株，除去荚果及杂质，洗净，晒干。鸡骨草味甘、微苦、性凉，有利湿退黄、清热解毒、疏肝止痛之功效，常用于治疗湿热黄疸、胁肋不舒、胃脘胀痛、乳痈肿痛等症状^[1]。现代药理研究表明，鸡骨草具有降脂保肝、抗菌、抗炎镇痛、增强免疫、抗氧化等多种生物活性^[2]。鸡骨草的化学成分主要含有三萜类、黄酮类、多糖类、生物碱类及蒽醌类化合物等，如三萜类化合物中以齐墩果烷型三萜皂苷为主^[3]、黄酮类化合物中以夏佛塔苷为主^[4]。而鸡骨草中的物质对金黄色葡萄球菌、肺炎克雷伯菌具有较好的抗菌活性^[5]。此外，鸡骨草提取物在促进伤口愈合，特别是外伤所致感染伤口，展现出了显著的功效^[6]。但是其作用机制尚未明确。鸡骨草作为一种具有丰富化学成分和广泛药理作用的植物，其社会效益和经济价值极高，具有巨大的开发潜力和广阔的市场前景。

金黄色葡萄球菌是引起大多数皮肤和软组织感染的主要病原体之一^[7]。同时也可以引起肺炎、伪膜性肠炎、心包炎等，甚至败血症、脓毒症等全身感染。金黄色葡萄球菌产生的毒素和侵袭性酶可以决定金黄色葡萄球菌的致病力强弱。金黄色葡萄球菌在临床和社区感染中检出率较高，主要存在于皮肤黏膜及软组织的创面中^[8-9]。特别是在院内感染中，其为主要的病原菌，若患者本身患有皮肤感染，金黄色葡萄球菌会延缓恢复速度，甚至加重病情^[9]。目前，临床上多采用万古霉素、替加环素、头孢罗磷、达托霉素、利奈唑胺、替考拉宁等相对敏感药

物进行治疗^[10]；但随着金黄色葡萄球菌耐药性的发生发展，尤其是耐甲氧西林金黄色葡萄球菌(MRSA)的出现，使临床治疗变得更加复杂棘手^[8, 11]。因此，迫切需要研发金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染相关治疗药物。本研究利用网络药理学、分子对接等方法探索鸡骨草对金黄色葡萄球菌所致皮肤感染炎症的作用机制。

1 材料与方法

1.1 药物靶点的筛选

本研究采用计算机系统生物学实验室的中药系统药理学数据库和分析平台(TCMSP, <https://old.tcm-sp-e.com/tcm-sp.php>)检索，并通过查阅文献筛选出鸡骨草中 19 种活性成分。并根据化合物口服生物利用度(OB) > 30%与类药性(DL) > 0.18 进行筛选。

1.2 疾病靶点的收集

以“skin inflammation”和“*Staphylococcus aureus*”为关键词检索 GeneCard (<https://www.genecards.org/>)和 OMIM (<https://www.omim.org/>)数据库，收集金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染的作用靶点。

1.3 构建“化合物-靶点”网络

为明确疾病靶点与药物靶点之间的关系，将两部分靶点取交集，输入 Cytoscape 软件构建化合物-靶点网络。Cytoscape 软件的核心架构是网络，每个节点是基因或活性成分，节点与节点之间的连接代表这些生物分子之间的相互作用，节点的 degree 值代表网络中节点与节点相连的数目，该值越大说明该活性成分或靶点越处于核心地位。

1.4 构建蛋白相互作用(PPI)网络

为更深层次探究靶点之间的相互作用关系，将

交集所得的共同靶点上传至线上软件 STRING (<https://cn.string-db.org/>), 构建 PPI 网络。将物种选择为 *homosapiens*, 其余参数保持默认设置, 获取 PPI 网络后, 隐藏游离靶点导出。

1.5 生物过程与通路分析

利用在线网络微生信, 选择基因本体 (GO) 和京都基因和基因百科全书 (KEGG) 进行富集分析, 将 1.3 项下获取的疾病与药物靶点的交集文件导入网站, 对网络进行 GO 分析和 KEGG 通路分析。

1.6 分子对接

为进一步筛选鸡骨草中可能干预金黄色葡萄球菌造成的皮肤感染的潜在活性成分, 将鸡骨草中的关键化合物与 1.4 项下筛选出的综合分数比较高的蛋白进行分子对接。从 PDB 数据库 (<https://www.rcsb.org/>) 下载靶蛋白的三维晶体结构, 从 PubChem 数据库 (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) 下载关键化合物的三维结构。小分子配体准备: 先用 Chem3D 打开活性成分, 优化力学结构, 存为 mol2 格式; 再用 AutoDockTools 软件检测配体 root, 选择配体可旋转的键, 导出文件为 PDBQT 格式。蛋白受体准备: 先采用 PyMOL-2.4.1 软件删除靶蛋白的水分子、小分子配体、结合的别的分子和对称的一条链, 保存为 PDB 格式; 再在 AutoDockTools 软件给受体加氢、计算电荷和添加原子类型, 保存为 PDBQT 格式。最后开展药物活性成分与目标蛋白的分子对接 (CB-Dock2: An accurate protein-ligand blind docking tool) [12-13]。

2 结果

2.1 潜在活性成分的筛选与对应靶点的收集

通过 TCMSP 数据库检索到鸡骨草活性成分 19 个, 见表 1。同时满足 OB>30%、DL>0.18 的鸡骨草活性成分有 3 个, 即漆黄素、β-谷甾醇和豆甾醇。通过 TCMSP 数据库获取鸡骨草活性成分, 共获得靶点 157 个。

2.2 疾病相关靶点的筛选

从 GeneCard 数据库中获得皮肤感染靶点 11 309 个, 金黄色葡萄球菌靶点 2 423 个; 从 OMIM 数据库中获得皮肤感染靶点 141 个, 金黄色葡萄球菌靶点 6 个; 以上 2 个数据库皮肤感染靶点共 11 450 个, 金黄色葡萄球菌靶点共 2 429 个, 见图 1 (GeneCards1、GeneCards2、OMIM1、OMIM2 分别表示从 GeneCard 数据库获得的皮肤感染靶点、从 GeneCard 数据库中获得的金黄色葡萄球菌靶点、

表 1 鸡骨草活性成分及靶点

Table 1 Active ingredients and target of active ingredients of *Abri Herba*

MOL 编号	有效成分	OB/%	DL
MOL002975	漆黄素	69.93	0.21
MOL000358	β-谷甾醇	36.91	0.75
MOL000449	豆甾醇	43.82	0.75
MOL000472	大黄素	24.39	0.23
MOL000263	齐墩果酸	29.02	0.75
MOL000476	大黄素甲醚	22.28	0.26
MOL004804	甘草四酸	22.05	0.74
MOL000105	原儿茶酸	25.36	0.03
MOL000356	羽扇豆醇	12.12	0.77
MOL000511	熊果酸	16.77	0.75
MOL000860	硬脂酸	17.82	0.14
MOL001729	大黄酚	18.63	0.20
MOL001787	腺苷	15.98	0.17
MOL001788	腺嘌呤	62.80	0.03
MOL004666	原儿茶酸	35.76	0.04
MOL007680	相思豆碱	70.83	0.09
MOL013319	α-D-葡萄糖醛酸	63.12	0.05
MOL013322	双花母草素	16.70	0.36
MOL013326	红藻氨酸	63.38	0.06

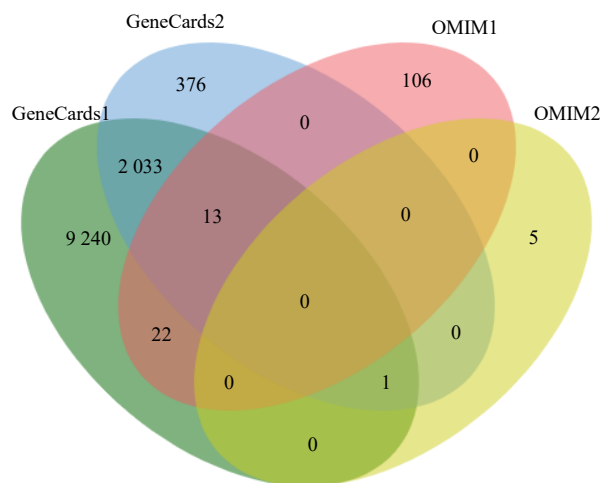


图 1 疾病相关靶点

Fig. 1 Disease related targets

从 OMIM 数据库获得的皮肤感染靶点以及从 OMIM 数据库中获得的金黄色葡萄球菌靶点)。

2.3 “化合物 - 靶点”网络的构建

将 2.1 项下 157 个鸡骨草活性成分靶点与 2.2 项下的 11 450 个皮肤感染靶点和 2 429 个金黄色葡萄球菌靶点输入 Venny 2.1 软件, 绘制韦恩图, 两者进行交集后获得 151 个共同靶点, 见图 2。采用 Cytoscape 软件构建的“药物 - 活性成分 - 靶点”网络, 连接化合物与靶点的边表示它们之间有作用关

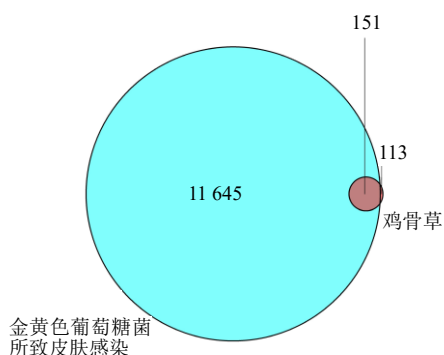


图 2 鸡骨草化学成分作用靶点与金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染相关靶点交集分析

Fig. 2 Intersection analysis of the target of the chemical composition of *Abri Herba* and the target related to skin infection caused by *Staphylococcus aureus*

系, 见图 3。

2.4 PPI 网络的构建与分析

应用 STRING 软件构建 PPI 网络, 见图 4, 共有 148 个节点, 1948 条边。在此网络图中, 根据综合分数得出胱天蛋白酶 (CASP) 3、CASP9、热休克蛋白 90 α 1 (HSP90AA1)、核受体共激活因子 2 (NCOA2)、JUN、B 淋巴细胞瘤-2 (Bcl-2)、Bcl-2L1、Bcl-2 相关髓细胞白血病序列 1 (MCL1)、Bcl-2 结合蛋白 (HRK)、Bcl-2L2、白细胞介素 (IL) -1B、CASP8、FASLG、马球样激酶 1 (PLK1)、细胞周期蛋白依赖性激酶抑制因子 1A (CDKN1A)、14-3-3zeta 蛋白 (YWHAZ)、连环蛋白 β 1 (CTNNB1)、

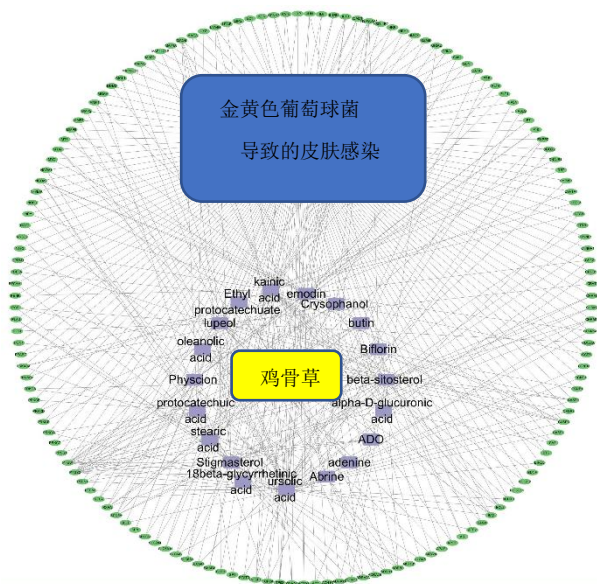


图 3 鸡骨草 - 活性成分 - 靶点网络

Fig. 3 *Abri Herba* - active ingredients - target network

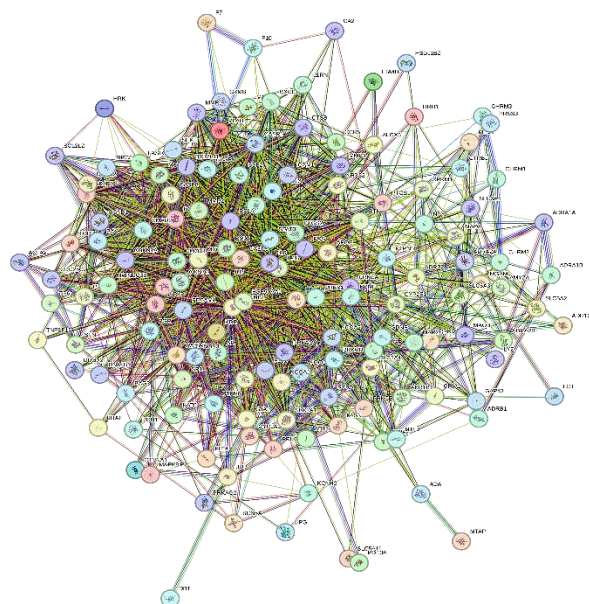


图 4 PPI 网络

Fig. 4 PPI network

AMPA 受体亚基 2 (GRIA2)、内皮一氧化氮合成酶 3 (NOS3)、丝裂原活化蛋白激酶 8 (MAPK8)、血小板内皮细胞粘附分子 1 (PECAM1)、过氧化物酶体增生激活受体 γ (PPARG)、V-Rel 网状内皮增生病毒癌基因同源物 A (RELA)、脑啡肽原 (PENK) 与视黄醇 X 受体 α (RXRA) 相互作用关系最强, 均为 0.999 分。

2.5 GO 与 KEGG 富集分析

GO 富集条目生物过程主要包括凋亡信号通路调控、药物应答、营养素水平应答, 分子功能包括 G 蛋白偶联受体活性、DNA 结合转录因子结合、蛋白激酶 C 活性, 见图 5。KEGG 富集信号通路主要包括脂质与动脉粥样硬化、乙型肝炎、糖尿病并发症中的蛋白质糖基化产物 (AGEs) 与其受体 (RAGE) 信号通路、人巨细胞病毒感染、细胞凋亡等, 见图 6。

2.6 分子对接

对鸡骨草中的关键化合物漆黄素、 β -谷甾醇和豆甾醇与 CASP3、CASP8、CASP9 进行对接, 见图 7, 对接的结合能见表 2, 分子对接得到的结合能若小于 -5 kcal/mol (1 cal = 4.2 J), 说明靶点与化合物具有一定的结合活性。且结合能越低, 两者结合越稳定。

3 讨论

目前, 临床治疗金黄色葡萄球菌感染的药物大多是抗生素, 然而随着抗生素的大量使用, 金黄色

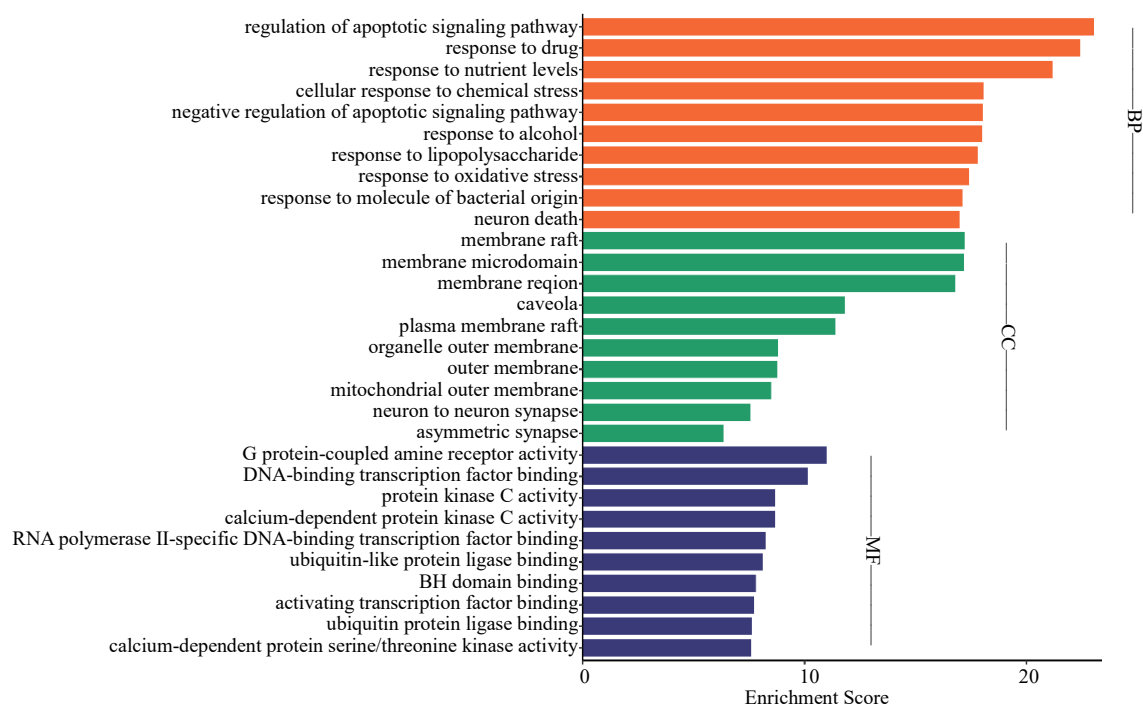


图 5 GO 富集分析

Fig. 5 GO enrichment analysis

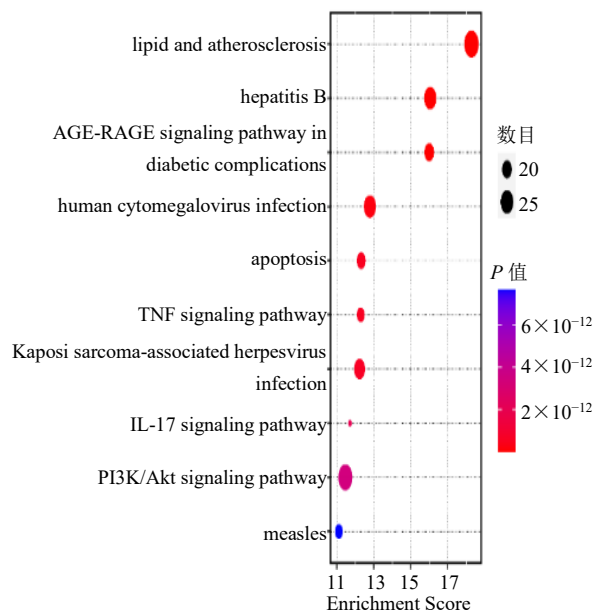


图 6 KEGG 富集分析

Fig. 6 KEGG enrichment analysis

葡萄球菌产生极大的耐药性，为临床治疗金黄色葡萄球菌带来巨大挑战。因此迫切需要非抗生素类的药物的研发。细菌分泌系统的底物通常与其致病性密切相关，使它们成为新型治疗药物的候选靶标^[14]。本研究中的鸡骨草中的活性成分漆黄素、 β -谷甾醇和豆甾醇分别可以抗金黄色葡萄球菌、破坏金黄色

葡萄球菌生物膜以及与金黄色葡萄球菌的蛋白质结合，从而影响细胞壁的完整性，抑制细胞生长或导致细胞死亡^[15-16]。说明鸡骨草中的活性成分可以从金黄色葡萄球菌的不同分泌系统底物来抑制金黄色葡萄球菌。漆黄素、 β -谷甾醇和豆甾醇对金黄色葡萄球菌的生物膜有显著抑制，已被证明可以防止浮游形式的细菌细胞在非生物表面上的黏附或植入，从而抑制生物膜的交配^[17]。此外，本研究探索了鸡骨草活性成分抗金黄色葡萄球菌的作用机制，如脂质与动脉粥样硬化、乙型肝炎、糖尿病并发症中的 AGE-RAGE 信号通路、人巨细胞病毒感染、细胞凋亡、TNF 信号通路、卡波西肉瘤相关疱疹病毒感染、IL-17 信号通路、PI3K/Akt 信号通路、麻疹等通路相关。其中最主要的通路是脂质与动脉粥样硬化，其主要靶点包括 CASP3、CASP8、CASP9、Bcl-2。而鸡骨草活性成分 β -谷甾醇和豆甾醇可分别与 CASP3、Bcl-2 蛋白氨基酸残基通过氢键作用力结合，说明鸡骨草可通过脂质与动脉粥样硬化通路的 CASP3、Bcl-2 靶标抗金黄色葡萄球菌皮肤感染。此外，金黄色葡萄球菌感染人体后，上皮细胞通过病原体识别受体（PRR）识别入侵的金黄色葡萄球菌，PRR 诱导促炎细胞因子和趋化因子的产生，导致吞噬细胞的募集和激活，金黄色葡萄

本研究发现漆黄素、 β -谷甾醇和豆甾醇可分别与脂质与动脉粥样硬化通路中蛋白质 CASP3、CASP8、CASP9 通过不同的氨基酸残基进行结合。表明鸡骨草的活性成分可以与这些蛋白相互作用通过调控脂质与动脉粥样硬化通路来发挥抗金黄色葡萄球菌皮肤感染的作用。漆黄素主要通过蛋白质 CASP3 的甲硫氨酸、谷氨酸及精氨酸等氨基

酸序列结合,与蛋白质 CASP8 的甘氨酸、异亮氨酸、酪氨酸和苏氨酸等氨基酸系列结合,与蛋白质 CASP9 的谷氨酰胺、苏氨酸、组氨酸及丙氨酸等氨基酸结合。豆甾醇主要通过和蛋白质 CASP3 的苏氨酸、组氨酸等氨基酸序列结合,与蛋白质 CASP8 的赖氨酸、亮氨酸、丝氨酸及异亮氨酸等氨基酸序列结合,与蛋白质 CASP9 的天门冬酰胺、丝氨酸、甲硫氨酸及丙氨酸等氨基酸序列结合。 β -谷甾醇与蛋白质 CASP3 的甘氨酸、甲硫氨酸、苏氨酸和组氨酸等氨基酸序列结合,与蛋白质 CASP8 的赖氨酸、甘氨酸、异亮氨酸和脯氨酸等氨基酸序列结合,与蛋白质 CASP9 的天门冬酰胺及苏氨酸等氨基酸序列结合。更印证了鸡骨草主要通过脂质与动脉粥样硬化通路来抑制金黄色葡萄球菌。

综上所述,本研究发现鸡骨草所含有的活性成分可作用于金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染的靶点,主要通过脂质与动脉粥样硬化通路来抑制金黄色葡萄球菌。本研究反映了鸡骨草多靶点联合抗金黄色葡萄球菌作用,为鸡骨草对金黄色葡萄球菌导致的皮肤感染的治疗提供了一定的理论依据。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 中国药典 [S]. 一部. 2020: 203.
- [2] 林梦瑶, 黄锁义, 李琳, 等. 鸡骨草研究的新进展 [J]. 中国野生植物资源, 2017, 36(1): 45-48.
- [3] 李庭树, 黄锁义. 鸡骨草的化学成分、药理作用及临床应用研究进展 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2019, 25(10): 226-234.
- [4] 徐柯心, 王宝丽, 贾子尧, 等. UPLC 同时测定鸡骨草中 2 种生物碱和 2 种黄酮碳苷的含量 [J]. 药物分析杂志, 2017, 37(4): 610-614.
- [5] Anwar R, Sukmasari S, Aisyah L S, et al. Antimicrobial activity of β -sitosterol isolated from *Kalanchoe tomentosa* leaves against *Staphylococcus aureus* and *Klebsiella pneumonia* [J]. *Pak J Biol Sci*, 2022, 25(7): 602-607.
- [6] Zeng Q, Xie H, Song H J, et al. *In vivo* wound healing activity of *Abrus cantoniensis* extract [J]. *Evid Based Complement Alternat Med*, 2016, 2016: 6568528.
- [7] Saeed K, Marsh P, Ahmad N. Cryptic resistance in *Staphylococcus aureus*: A risk for the treatment of skin infection? [J]. *Curr Opin Infect Dis*, 2014, 27(2): 130-136.
- [8] 曾海燕, 罗婷婷, 游建华. 手术切口感染患者分泌物中金黄色葡萄球菌检出情况及耐药性分析 [J]. 中国医学创新, 2024, 21(30): 146-149.
- [9] 吴馨昱, 闫巧云. 1 例大疱性类天疱疮伴压疮合并耐甲氧西林金黄色葡萄球菌感染患者的个性化护理 [J]. 当代护士: 下旬刊, 2024, 31(10): 90-93.
- [10] 孙豪, 董晓蒙. 金黄色葡萄球菌感染的临床特征与耐药性研究 [J]. 山东医学高等专科学校学报, 2024, 46(4): 78-80.
- [11] 崔文娟, 万明顺, 陈玲境, 等. 儿童皮肤感染金黄色葡萄球菌临床分布、耐药性及皮损特点分析 [J]. 临床皮肤科杂志, 2024, 53(9): 523-526.
- [12] Liu Y, Yang X C, Gan J H, et al. CB-Dock2: Improved protein-ligand blind docking by integrating cavity detection, docking and homologous template fitting [J]. *Nucleic Acids Res*, 2022, 50(W1): W159-W164.
- [13] Yang X C, Liu Y, Gan J H, et al. FitDock: Protein-ligand docking by template fitting [J]. *Brief Bioinform*, 2022, (23)3: bbac087.
- [14] Green E R, Meccas J. Bacterial secretion systems: An overview [J]. *Microbiol Spectr*, 2016, 4(1): 10.1128/microbiolspec.VMBF-0012-2015.
- [15] Shidiki A, Vyas A. Molecular docking and pharmacokinetic prediction of phytochemicals from *Syzygium cumini* in interaction with penicillin-binding protein 2a and erythromycin ribosomal methylase of *Staphylococcus aureus* [J]. *BioTechnologia(Pozn)*, 2022, 103(1): 5-18.
- [16] Vadakkan K, Hemapriya J, Ngangbam A K, et al. Biofilm inhibition of *Staphylococcus aureus* by silver nanoparticles derived from *Hellenia speciosa* rhizome extract [J]. *Microb Pathog*, 2024, 196: 106933.
- [17] Anokwah D, Asante-Kwatia E, Asante J, et al. Antibacterial, resistance modulation, anti-biofilm formation, and efflux pump inhibition properties of *Loeseneriella Africana* (Willd.) N. Halle (Celastraceae) stem extract and its constituents [J]. *Microorganisms*, 2023, 12(1): 7.
- [18] Chen H Q, Zhang J Y, He Y, et al. Exploring the role of *Staphylococcus aureus* in inflammatory diseases [J]. *Toxins*, 2022, 14(7): 464.
- [19] la Torre Fabiola V De, Ralf K, Gabriel B, et al. Anti-inflammatory and immunomodulatory effects of *Critonia aromatisans* leaves: Downregulation of pro-inflammatory cytokines [J]. *J Ethnopharmacol*, 2016, 190: 174-182.
- [20] Alzarea S I, Alasmari A F, Alanazi A S, et al. Butin attenuates arthritis in complete freund's adjuvant-treated arthritic rats: Possibly mediated by its antioxidant and anti-inflammatory actions [J]. *Front Pharmacol*, 2022, 13: 810052.
- [21] 陈志霞, 陈思琪, 冯淑仪. 基于网络药理学及实验验证探讨草薢止带方治疗外阴阴道假丝酵母菌病的作用机制 [J]. 中草药, 2024, 55(20): 6995-7005.

[责任编辑 高源]