

Study on the Therapeutic Mechanism of Sanhuang Xiexin Decoction on Diabetic Nephropathy Based on Network Pharmacology and Molecular Docking

Ying CHEN¹ #, Liting QIAN² #, Jing GUAN¹, Pengju LIU²,
Cheng YU² *, Danning SONG² *, & Shuang JIANG² *

¹ Department of Clinical Medical, Changchun University of Chinese Medicine,
Changchun, China

² Department of Health Management, Changchun University of Chinese Medicine,
Changchun, China

SUMMARY. The aim of this study was to explore the therapeutic mechanism of Sanhuang Xiexin Decoction on diabetic nephropathy (DN) based on the systematic analysis of network pharmacology and molecular docking technology. Through TCMSP platform, GeneCards, CTD, OMIM and TTD databases, the active ingredients and action targets of Sanhuang Xiexin Decoction and the disease targets of DN were collected and sorted out. DAVID database was used to enrich and analyze the key genes of the active ingredients in Sanhuang Xiexin Decoction, then the key genes were linked to the active ingredients by molecular docking, and the data were visualized with relevant software. The main active ingredients in Sanhuang Xiexin Decoction in treating DN were scutellarin, quercetin, baicalein β -sitosterol, aloe emodin, etc. Twenty seven genes including TP53, MAPK1, AKT1, RELA, ESR1, MAPK14, FOS, TNF, RXRA, CAV1 and MYC were key genes of Sanhuang Xiexin Decoction in treating DN. The GO and KEGG analysis results revealed 54 biological processes, 7 cell components and 18 molecular functions related to the therapeutic mechanism of Sanhuang Xiexin Decoction. Active ingredients in Sanhuang Xiexin Decoction, such as scutellarin, aloe emodin, quercetin, etc., could participate in the biological processes, such as the signal transduction, inflammatory response and regulation of cell apoptosis, and regulate PI3K-AKT, MAPK, TNF, AGE-RAGE, TGF- β and VEGF signaling pathways to play an intervention role. Sanhuang Xiexin Decoction can exert its therapeutic effect by regulating multiple signaling pathways and through various mechanisms in DN.

RESUMEN. El objetivo de este estudio fue explorar el mecanismo terapéutico de la decocción de Sanhuang Xiexin en la nefropatía diabética (ND) basado en el análisis sistemático de la farmacología de red y la tecnología de acoplamiento molecular. A través de la plataforma TCMSP, las bases de datos GeneCards, CTD, OMIM y TTD, se recolectaron y clasificaron los ingredientes activos y los objetivos de acción de Sanhuang Xiexin Decoction y los objetivos de enfermedad de DN. La base de datos DAVID se utilizó para enriquecer y analizar los genes clave de los ingredientes activos en la decocción de Sanhuang Xiexin, luego los genes clave se vincularon a los ingredientes activos mediante acoplamiento molecular y los datos se visualizaron con el software correspondiente. Los principales ingredientes activos en la decocción de Sanhuang Xiexin para el tratamiento de la ND fueron escutellarina, quercetina, baicaleína β -sitosterol, aloe emodina, etc. MYC fueron genes clave de la decocción de Sanhuang Xiexin en el tratamiento de la ND. Los resultados del análisis GO y KEGG revelaron 54 procesos biológicos, 7 componentes celulares y 18 funciones moleculares relacionadas con el mecanismo terapéutico de la decocción Sanhuang Xiexin. Los ingredientes activos en la decocción de Sanhuang Xiexin, como la escutellarina, el aloe emodina, la quercetina, etc., podrían participar en los procesos biológicos, como la transducción de señales, la respuesta inflamatoria y la regulación de la apoptosis celular, y regular PI3K-AKT, MAPK, TNF, Vías de señalización AGE-RAGE, TGF- β y VEGF para desempeñar un papel de intervención. La decocción Sanhuang Xiexin puede ejercer su efecto terapéutico mediante la regulación de múltiples vías de señalización y a través de varios mecanismos en DN.

KEY WORDS: diabetic nephropathy, molecular docking, network pharmacology, Sanhuang Xiexin decoction.

* Authors to whom correspondence should be addressed. E-mail: jiangshuang_2000@163.com ; Yanchen126@yahoo.com

Ying CHEN and Liting QIAN are contributed equally to this work, they are co-first authors.