

基于“质谱组学-生物信息学-分子对接”的 功效靶点及关键植物成分研究系统

彭章晓, 李恒, 李明利, 胡哲, 江涛, 杨孝德, 陈晨, 屠方铭, 舒烈波*
(上海欧易生物医学科技有限公司, 上海, 201112)

摘 要: 化妆品特色植物成分复杂, 其中的天然活性物质也多种多样, 发挥的功效也各有不同。准确定性植物原料天然活性成分, 明确关键成分功效机理已成为化妆品研究开发的热点。本文分别介绍了天然产物成分分析、网络药理学、分子对接和高通量组学技术在皮肤和化妆品领域中的应用情况, 整合成“成分分析-网络药理学-分子对接-组学功效挖掘”植物天然成分研究系统, 在化妆品天然成分功效研究中显示出巨大的潜力, 为化妆品开发提供了新的思路。

关键词: 天然产物; 成分分析; 网络药理学; 分子对接; 多组学

通讯作者简介: 舒烈波, 上海欧易生物医学科技有限公司质谱技术总经理, 研究方向: 蛋白质组学、代谢组学。

E-mail: liebo.shu@oebiotech.com。



舒烈波

植物成分来源天然, 丰富多样, 且具有多种生物活性功效, 数千年来, 被广泛应用于美容护肤品中。据《神农本草经》《本草纲目》记载, 我国的很多特色植物资源很早就作为原料应用到“化妆品”之中^[1]。植物活性成分副作用小且功效温和, 随着人们健康意识增强, 以植物活性成分为主的美容产品越来越受到消费者的青睐。在国家药监局发布的《已使用化妆品原料目录(2021年版)》中也已经收录了3000多个植物原料。化妆品特色植物原料开发已成为化妆品领域研究开发的热点。

在天然成分化妆品开发中, 特色植物原料的成分分析及功效机理研究具有深远的意义。它不仅关乎产品的质量 and 安全性, 还直接影响到消费者的使用体验、健康以及企业市场竞争力。了解植物原料中的天然活性成分, 找到成分作用靶点, 明确功效机理, 将有助于配方师根据目标消费者的需求和产品定位, 精准选择原料, 优化配方; 还可以为新产品开发, 生产工艺质控和优化等提供科学依据, 发现新的植物资源, 开发具有独特功效的美容护肤产品。此外, 利用科学的手段明晰植物原料的信息, 包括植物原料的来源、物质基础及功效机理, 不仅可以增强消费者对产品的信任度和满意度, 也给相关植物新原料的监管审批提供了科学依据。本文将详细介绍“成分分析-网络药理学-分子对接-组学功效挖掘”的植物天然成分研究体系, 为化妆品开发提供新的研究思路。

1. 化妆品特色植物天然成分分析

1.1 植物护肤功效成分类型及功效

化妆品特色植物中的代谢物多种多样, 既包含初级代

谢产物, 如糖类, 氨基酸, 脂质与核苷酸类, 也包含次级代谢产物, 如黄酮类, 萜类以及生物碱类等, 其中很多成分具有护肤功效(表1)。近年来研究发现, 可以用于化妆品中的植物天然成分主要有植物多酚、多糖、生物碱、萜类以及有机酸等。

多酚(polyphenols)是植物中的一大类次生代谢物。它是具有芳香环且至少有一个羟基的化合物, 目前已发现8000多种多酚物质。多酚可以简单地分为黄酮类(包括花青素、黄烷醇、黄烷酮、黄酮醇、黄酮酮和异黄酮等)和非黄酮类(如酚酸、氧杂蒽酮、二苯乙烯、木脂素和单宁类等)多酚^[2]。多酚中羟基和苯基的存在为它们提供了吸收紫外线辐射、中和ROS、抗炎、抗菌及金属螯合等特性, 研究表明多酚在皮肤护理中可发挥美白、防晒、抗氧化、抑菌、抗衰老等多种功效^[3]。

多糖(polysaccharide)是由超过10个单糖分子(如葡萄糖、果糖、半乳糖、甘露糖、鼠李糖、阿拉伯糖等)以糖苷键结合的糖链结构化合物。研究表明植物多糖对于皮肤具有保湿补水、抗衰老、美白祛斑、抗敏抑菌和愈创修复等多重功效^[4]。

生物碱(alkaloid)是自然界中的一类含氮的碱性有机化合物, 大多数有复杂的环状结构, 氮素多包含在环内。目前医学上生物碱被广泛应用于肿瘤, 心血管, 神经系统及免疫性疾病治疗。在皮肤研究领域, 生物碱具有抗氧化、抗炎、抑菌、抗皱、美白等功效, 用于生产护肤品及皮肤病药物^[5]。

萜类化合物(terpenoids)是一类广泛存在于植物体内的碳氢化合物。它以异戊二烯为基本单元, 用不同方式首尾相接构成的聚合体。很多萜类化合物被应用于疾病治疗, 如肿瘤, 心血管疾病以及神经系统疾病等。萜类化合

物因其芳香气味及美白、防晒、抗氧化、抑菌、抗衰老等多种功效被广泛用于化妆品和护肤品^[6]。

有机酸（organic acids）是植物体内合成的一类酸性有机化合物，主要分为三类：羧酸、糖酸和氨基酸。在皮肤科学领域，有机酸具有去角质、保湿、提亮、抗皱和祛痘的功效，广泛添加于化妆品中^[7]。

表 1 化妆品特色植物天然活性成分及功效 ^[3]				
植物拉丁名	植物中文名	天然活性成分	功效	文献
<i>Acacia nilotica</i>	阿拉伯金合欢	表没食子儿茶素-3-没食子酸酯、黄酮类化合物、酚类化合物	抗炎、抗衰老、抗氧化	[8]
<i>Achillea spp.</i> <i>Achillea sivasica</i>	矢车菊 属 锡瓦矢车菊	1,8- 辛烯酮	抗酪氨酸酶、美白	[9]
<i>Agastache rugosa kuntze</i>	藿香	苯丙烷类、萜类、迷迭香酸、提香素、金合欢素、藿香苷、甲基黄酮、藿香醇、芹菜素、槲皮素	抗老化、抗氧化、抗弹性蛋白酶、抗透明质酸酶	[10]
<i>Benincasa hispida</i>	冬瓜	三萜类、黄酮类、胡萝卜素、糖苷、谷甾醇、糖类、糖醛酸	防老化	[11]
<i>Camellia sinensis</i>	山茶花	表儿茶素-3-没食子酸酯，表儿茶素（EC），EGCG	抗老化、抗炎	[12]
<i>Centella asiatica</i>	积雪草	乌苏烷和齐墩果烷型五环三萜、羟基积雪草苷、羟基积雪草酸、积雪草苷、积雪草酸	抗衰老、抗透明质酸酶、抗弹性蛋白酶、抗皱、抗氧化、消炎	[13]
<i>Coffee arabica</i>	咖啡	绿原酸、奎尼酸、阿魏酸、羟基肉桂酸、咖啡醇、咖啡豆醇	伤口愈合、抗氧化剂、紫外线防护剂、抗光致癌、抗炎	[14]
<i>Coriandrum sativum</i> L.	芫荽 / 香菜	槲皮素、山奈酚、金合欢素、对香豆酸、香草酸、顺式和反式阿魏酸	上调氧化防御系统。防止UVb引起的皮肤损伤	[15]
<i>Crataegus pinnatifida</i> Bge.	山楂	低聚原花青素及其糖苷、绿原酸、芦丁、槲皮素、异槲皮素、表儿茶素、没食子酸、4-氨基苯甲酸	抗氧化、抗光老化、胶原酶抑制活性、抗光老化、抗炎	[16-17]
<i>Curcuma longa</i>	姜黄	姜黄素、萜类、酚类化合物	抗老化、抗氧化	[18-19]
<i>Cyclopia spp.</i>	豆科金雀儿属	黄酮类、黄酮类、橙皮苷、芒果苷	抗氧化、抗炎、防晒、减少红斑、水肿、皮肤硬化，调节表皮增生	[20]

续表 1				
植物拉丁名	植物中文名	天然活性成分	功效	文献
<i>Emblica officinalis</i>	余甘子	黄酮类化合物、酚酸（如鞣花酸和没食子酸）、单宁（如石榴苷、花梗苷和余甘子苷）	广谱抗氧化、抗肿瘤抗皱、抗酪氨酸酶、抗炎	[21]
<i>Eugenia dysenterica</i>	止泻番 樱桃	槲皮素和没食子酸	降低胶原酶活性，抗衰老	[22]
<i>Foeniculum vulgare</i>	茴香	亚麻酸、油酸和亚油酸	抗光老化	[23]
<i>Fragaria vesca</i> L.	野草莓	黄酮类、儿茶素、酚酸、鞣花单宁、原花青素、鞣花酸	抗黑色素、抗氧化剂、光保护剂	[24]
<i>Hippophae rhamnoides</i>	沙棘	木麻黄苷、 β -胡萝卜素和生育酚槲皮素、山奈酚、异鼠李素、儿茶素、黄酮类化合物、槲皮素、油酸和亚油酸、原花青素、槲皮素、山奈酚、杨梅素、异鼠李素、山奈酚-3-芸香糖苷	美白、抗衰老、抗炎、抗氧化剂、光保护剂	[25-26]
<i>Hydrangea serrata</i> (Thunb.) Ser	粗齿 绣球	绣球酚	光保护剂、抗氧化剂、保湿特性、抗衰老	[27-28]
<i>Hypericum perforatum</i>	贯叶 连翘	槲皮素	防晒	[29]
<i>Ixora parviflora</i>	仙丹花	白杨素 5-O-B-d-木吡喃苷、绿原酸	抗光老化、抗氧化	[30]
<i>Michelia alba</i>	白兰	N- 甲酰亚胺倍半萜、萜烯、阿朴啡、苯类化合物、氧代阿朴啡、类固醇、木脂素	抑制酪氨酸酶、抗氧化、光保护剂	[31-32]
<i>Momordica charantia</i>	苦瓜	茶黄素、黄酮类化合物、normordin	抗氧化、组织重塑、保湿和美白	[33]
<i>Myristica fragrans</i> Houtt	肉豆蔻	马塞木脂素	美白、抑制UVB诱导的炎症、抗皮肤光老化	[34]
<i>Panax ginseng</i>	人参	绿原酸、丁香酸、山奈酚、槲皮素、白藜芦醇、柚皮素、龙胆酸、芦丁、儿茶素、N-和P-香豆酸、香草酸	抗皮肤老化、光防护作用、美白、抗酪氨酸酶活性	[35-36]
<i>Patrinia villosa</i>	攀倒甑	山奈酚	美白	[37]
<i>Penthorum Chinese pursh</i>	扯根菜	槲皮苷	抗氧化、抗老化、紫外线防护剂	[38]
<i>Polypodium leucotomos</i>	水龙骨科	阿魏酸、咖啡酸、肉桂酸、绿原酸	抗氧化、抗光老化、抗光致癌	[39]

续表 1

植物拉丁名	植物中文名	天然活性成分	功效	文献
<i>Populus nigra</i>	黑杨	咖啡酸、异阿魏酸、肉桂酸、水杨苷	抗氧化、抗衰老	[40]
<i>Punica granatum</i>	石榴	鞣花单宁、鞣花酸、安石榴苷、花青素	抗光老化、抗氧化、光保护	[41]
<i>Rhus coriaria</i> L.	西西里漆树	单宁、杨梅素衍生物、槲皮素和没食子酸黄酮类化合物、酚酸和没食子单宁	抗氧化、抗癌、抗纤维化、基因保护作用	[42-43]
<i>Spatholobus suberectus</i>	密花豆 / 鸡血藤	芒柄花素	抗酪氨酸酶活性, 抑制UVB 诱导的ROS 产生	[44]
<i>Theobroma cacao</i> L.	可可	单体 (-) 表儿茶素和 (+) 儿茶素、原花青素、黄酮醇	抗氧化、抗炎、光防护	[45]

1.2 化妆品特色植物成分分析方法汇总

成分分析是一种利用化学、物理以及现代分析技术手段, 对样品中所包含的各种化学成分进行定性和定量检测的方法。它通过对物质或产品进行分解, 以了解其内部组成部分及其比例, 揭示其性质、功能和应用价值。化妆品特色植物中的化学成分复杂, 天然活性物质多种多样, 要了解植物成分的护肤功效, 就需要深入研究它们的化学成分。随着科学技术的发展, 现代分析技术越来越多地应用于特色植物及中药成分的分析中, 主要包括光谱技术、核磁共振、色谱和色谱质谱联用技术等。

1.2.1 光谱技术

不同结构组成的各种化合物都有其自身的特征光谱。光谱技术就是通过利用光谱学原理来对物质进行定性、定量和结构分析的方法, 能实现多元素分析。光谱技术包括紫外分光光度法、红外光谱法、原子吸收光谱法、荧光光谱法、拉曼光谱法等。光谱技术具有分析速度快、检出限低、灵敏度高等优点, 广泛应用于植物天然成分研究。谢田伟等^[46]先对枇杷花精油进行分离纯化得到黄酮纯化物, 后于紫外分光光度仪中扫描其在紫外-可见光中的吸收光谱, 并在510 nm处定量测定黄酮的含量。纪亮等^[47]运用红外光谱技术研究栀子仁抗氧化活性物质, 采集了甘草汁炮制前后的栀子仁红外光谱。利用聚类分析、主成分分析、偏最小二乘回归分析等方法解析红外光谱信息与抗氧化药效信息之间的关系, 确认西红花苷是栀子抗氧化活性成分。Xie等^[48]利用傅立叶变换近红外光谱技术测定发酵冬虫夏草菌丝体中的精氨酸含量, 在最佳预测模型中, 竞争自适应重加权采样-最小二乘支持向量机(CARS-LSSVM)

模型表现最好, 预测确定系数为0.8370, 预测残差偏差为2.4741, 预测均方根误差为0.0841, 该方法能无损检测发酵菌丝体中的精氨酸含量。

1.2.2 核磁共振波谱技术

核磁共振波谱是一种基于特定原子核在外磁场中吸收了与其裂分能级间能量差相对应的射频场能量而产生共振现象的分析方法, 主要有氢谱(¹H-NMR)和碳谱(¹³C-NMR)两种。核磁共振波谱能以快速、简单且无损的方式, 从复杂混合物中提供有关化学成分的全面信息, 对多种成分进行同步分析, 常用于辨别复杂混合物的化学性质, 具有样品制备简单、高重现性、非选择性、非破坏性、结构解析能力以及易于自动化等特点。Marchetti等^[49]利用¹³C-qNMR全面表征和测定八种不同的大麻品种中的主要非精神活性大麻素(大麻二酚、大麻二酚酸、大麻萜酚和大麻萜酚酸)。Li等^[50]对辣木叶中的多糖物质进行¹H-NMR分析, 发现了一种具有免疫活性的新型多糖。¹H-NMR波谱技术还被用于分析番石榴(*Psidium guajava*)叶提取物中的成分, 发现了槲皮素、阿魏酸和没食子酸等多种天然活性物质^[51]。

1.2.3 色谱技术

色谱法又称层析法, 是一种物理化学分离分析方法。它是利用混合物中各组分物理化学性质的差异, 使各组分不同程度地分布在两相中, 其中一相是固定相, 另一相是流动相。由于各组分受固定相作用所产生的阻力和受流动相作用所产生的推动力不同, 从而产生差速迁移而达到分离的目的。经色谱法分离后的组分可采用合适的手段逐个进行分析。色谱法因具有高灵敏度、高选择性、高效能、分析速度快等优点而被广泛应用于各个领域, 成为多组分混合物分析最重要、最有效的方法。在植物天然产物分析中, 常用的色谱有薄层色谱、毛细管电泳、生物色谱、超临界流体色谱、气相色谱以及高效液相色谱等。

Hrichi等利用气相色谱(GC)分析抗皮癣乳膏原料突尼斯杏仁(*Prunus armeniaca* L.)的挥发成分, 发现了苯甲醛、苯甲醇和桉树油醇等具有抗真菌功效的活性物质^[52]。Popoola等对南非蜡菊(*Helichrysum rutilans*)的甲醇提取物进行高效液相色谱(HPLC)分析, 分离鉴定到7种具有抗氧化活性的黄酮类和萜类代谢物, 证明了其可以作为化妆品原料的潜力^[53]。张小艺^[54]采用超临界流体色谱技术检测了藁本类药材中的成分, 对12种活性物质进行了定量分析, 建立了藁本类药材指纹图谱, 并对活性成分的功效进

行了系统研究。

1.2.4 色谱质谱联用技术

质谱技术是通过将样品分子离子化，然后利用磁场或电场对离子进行分离和检测，从而确定分子的质量和结构信息的一种分析方法。近年来，质谱分析技术在分辨率、准确性和灵敏度方面不断提高，特别是多功能杂化质谱新技术为复杂成分的分析 and 鉴定提供了多样的扫描模式和碎裂方式，能够获得分辨率高、准确性好、覆盖度广的质谱数据，为成分鉴定提供高质量的数据支持。

色谱-质谱联用技术是将色谱的分离效率和质谱的结构鉴定能力有机地结合在一起，使二者各取所长，将样品的分离、定量以及定性成为连续的过程，提高复杂体系中微量成分的识别和鉴定效率，现已广泛应用于中药/植物天然成分分析和鉴定。常用的色谱-质谱联用技术包括气相色谱-质谱联用（GC-MS）和液相色谱-质谱联用（LC-MS）。

气相色谱-质谱联用（GC-MS）是通过将 GC 与质谱仪联用，可以实现对植物中挥发性成分的准确测定和结构鉴定。GC-MS 具有分离效果好、灵敏度高、重现性好等优点，在植物成分分析中得到了广泛应用。GC-MS 常被用于测定植物中的精油、萜类化合物等挥发性成分的含量和结构。Muzykiewicz-Szymańska 等^[55]利用 GC-MS 分析地榆（*Sanguisorba officinalis* L.）乙醇提取物中的植物精油，鉴定到 22 种具有抗菌抗氧化功效的活性物质，显示其作为化妆品原料的潜力。GC-MS 还被用于分析巴基斯坦西柚（*Citrus paradisi*）果皮的水蒸精油，发现柠檬烯、α-萜品醇、石竹烯、δ-紫吗啡烯、榄香烯醇、γ-桉树酮、诺卡酮和邻苯二甲酸二异辛酯等活性物质，该精油还具有抗葡萄糖苷酶、抗淀粉酶活性以及对酪氨酸酶的抑制作用，可作为护肤品的候选原料^[56]。Huang 等^[57]对西番莲（*Passiflora edulis*）果皮丙酮提取物进行 GC-MS 分析，发现了多种与皮肤老化，抗菌和抗癌功效相关的活性物质。

液相色谱-质谱联用（LC-MS）是植物成分分析中常用的联用技术之一。通过将 HPLC 与质谱仪联用，可以实现对植物成分的快速分离和准确测定。LC-MS 具有分离度高、灵敏度高、结构信息丰富等优点，在植物成分分析中得到了广泛应用，可用于测定植物中的黄酮类、生物碱类、多酚类等活性成分的含量和结构。Wu 等^[58]利用 LC-MS 对牛膝（*Achyranthes bidentata*）的活性成分进行了分析，共鉴定出 281 种化合物，包括生物碱、类黄酮、萜

类、苯丙烷、氨基酸、糖和糖苷等，并发现其中 4 种化合物可以入组，5 种化合物可以进入大鼠脑组织来发挥治疗脑部疾病的功效。Song 等^[59]对茯苓（*Poria cocos*）进行了 LC-MS 成分分析，共鉴定到 52 中活性成分。Pan 等^[60]使用 LC-MS 的方法研究了杜仲（*Eucommiae cortex*）在炮制过程中成分的变化，共发现有 517 种化合物含量发生了改变，尤其是活性成分松柏醛显著增加。此外，植物天然成分 LC-MS 分析还可以与多种技术方法联合使用，在准确鉴定活性成分的基础上通过生物信息分析、实验验证和组学数据挖掘实现活性成分功效解析，相关案例将在下文详细说明。

1.3 植物天然产物成分分析研究现状

1.3.1 植物天然产物数据库

植物天然产物经过数百万年的进化获得了独特的化学多样性。这导致了它们的生物活性和类似物的多样性。在现代化学发展起来之前，植物天然产物就已经广泛应用于医药，食品和化妆品中。目前已知约有 200,000 种天然化合物，但只有一小部分植物和微生物来源被探索出来，呈现出巨大的未开发潜力。随着技术发展研究的深入，全球多个国家、地区及商业机构建立了超过 100 个植物天然产物相关的数据库。目前，还没有全球公认的天然产物数据库资源。Sorokina 和 Steinbeck^[61]汇总了 2000 年至 2019 年间文章中报道的 123 个天然产物数据库，其中有 9 个数据库是国内学者建立的（表 2）。

表 2 中国天然产物数据库^[61]

数据库名称	天然产物类型	天然产物数量	文献
TCMDB@Taiwan (Traditional Chinese Medicine Database@Taiwan)	植物	58,351	[62]
CEMTDD (Chinese Ethnic Minority Traditional Drug Database)	植物	4060	[63]
CHDD (Chinese Traditional Medicinal Herbs database)	植物	>30,000	[64]
ETCM (Encyclopedia of Traditional Chinese Medicine)	通用	7274	[65]
CNPD (Chinese Natural Products Database)	通用	>57,000	[66]
TCMID (Traditional Chinese Medicine Integrated Database)	植物	12,549	[67]
TCMSP (Traditional Chinese Medicine Systems Pharmacology Database)	植物	29,384	[68]
YaTCM (Yet another Traditional Chinese Medicine database)	植物	47,696	[69]

1.3.2 植物天然产物质谱数据库

目前 LC-MS 技术已经成为天然产物成分分析的主流方法。通过质谱可以获得大量天然化合物的精确质量数、元素组成、特征离子碎片、保留时间等多元数据。要利用这些数据实现天然产物的准确鉴定与注释，就必须依赖高效、全面且注释良好的质谱数据库^[70]。利用数据库比对实测数据和标准化合物的保留时间、加合物离子峰及特征碎片离子等信息，能够高效精准地实现植物天然产物的定性分析与定量分析^[71]。表 3 中展示了植物天然产品常用的质谱数据库。

表 3 植物天然产物相关开源质谱数据库^[70]

名称	数据来源	功能特点	网址	文献
全球天然产物社会分子网络 (GNPS)	MS/MS	分子网络, 235850 张谱图, 批量搜索	http://gnps.ucsd.edu	[72]
Mass Bank	FTMS, MS/MS, LC-MS	公开免费, 47000 张谱图, 支持数据下载, 合并谱图	https://massbank.eu/MassBank/	[73]
METLIN	FTMS, MS/MS, LC-MS	公开免费, 不同的碰撞能图谱, 72000 张二级质谱图, 批量搜索	https://metlin.scripps.edu/landing_page.php?pgcontent=mainPage	[74]
日本理化学研究所串联质谱数据库 (ReSpect)	LC-MS	公开免费, 9017 条质谱数据, 针对植物代谢组学	http://spectra.psc.riken.jp/	[75]
植物代谢物注释工具箱 (PlantMAT)	LC-MS, MS/MS	公开免费, 枚举组合工具, 针对特定代谢物	https://sourceforge.net/projects/plantmat/	[76]
质谱云数据库 (mzCloud)	MS ⁿ	公开免费, 4717927 个质谱数据, 前体离子指纹技术算法	https://www.mzcloud.org/	

除了开源的公共数据库之外，许多科研机构和质谱仪器厂商也纷纷独立开发专属的中药/天然产物数据库，比如 Thermo 开发的 OTCML 数据库收录了近 1200 余种中药化合物的质谱图，是快速鉴定中药成分强有力的工具。SCIEX 建立的中药 MS/MS 高分辨质谱数据库，以《中国药典》中的中药品种有效成分为基础，涵盖了皂苷类、黄酮类、黄酮苷类、三萜类、苯乙醇苷及有机酸等类别，总计收录了近 1300 种化合物。

天然产物种类繁多，结构极其多样，并且同分异构体以及糖苷和苷元类化合物常常同时存在。糖苷类化合物在质谱源中容易发生原位裂解，脱掉糖苷变成苷元。如果只依赖于质谱的一级精确分子量 (MS1) 和二级质谱碎裂谱图 (MS2) 进行定性，难以将植物中的同分异构体以及糖

苷和苷元很好的区分出来。因此，对于天然产物的成分鉴定分析还需要借助色谱分离保留时间这个维度的信息。LuMet-CM 数据库 (欧易生物, 上海) 是一个商业化的中药天然产物成分及其代谢产物数据库，总库容为 39 万个化合物，其中包括 5000 余种中药标准品、15000 余种经过人工核对的中药活性成分结构库及 370000 余种中药代谢产物。该数据库信息完善，包含有保留时间、一级精确质量信息、二级质谱碎片信息、中药成分分类信息、中药成分药材来源信息、分子量、分子式、CAS 号、KEGG 号、InChIKey，采用标准化的检测分析流程，结合高质量的中药植物成分数据库，可以对植物提取物中的成分进行精准注释与定量分析^[58-60]，解析植物提取物的物质基础，为后续其功效和作用机制研究奠定基础。

2. 网络药理学分析

2.1 网络药理学概念

英国药理学家 Andrew L Hopkins 在 2007 年首次提出了网络药理学 (Network pharmacology) 这一概念^[77]。它是将网络科学、系统生物学、计算机科学、生物信息学和统计学等学科综合应用于研究的交叉学科。网络药理学基于系统生物学的原理，从整体的角度阐释疾病发展的过程和药物对机体的作用机制，将疾病在体内的发展状态和药物对机体的作用可视化，用系统的思想在网络的层面分析药物的作用机制，挖掘药物的有效成分，构建药物有效作用靶点与疾病靶点的蛋白相互作用网络，探索药物治疗疾病的靶点，并进一步对这些靶点进行疾病—药物—分子—靶点互相作用的可视化分析^[78]，从而为疾病的探索和新药的研发提供指引。简单来说，一个药物可能同时调控多个蛋白，或者多个药物共同作用于一个蛋白，进而对疾病产生更好的治疗效果。网络药理学就是把药物有效成分和疾病治疗靶点蛋白的互作网络具现出来。近几年来，网络药理学广泛应用于研究中药的药效成分和分子作用机制。化妆品特色植物很多都是中草药，其活性成分对皮肤功效作用机制研究完全适用网络药理学分析。

2.2 网络药理学研究思路

以中药研究为例，网络药理学研究思路包括以下几个过程^[78-79]：

①通过文献调研、数据库检索、软件预测或者成分分析实验数据获得中药/特色植物的活性成分及其功效、靶

点、毒性等信息。这里可用的数据库包括中药系统药理学分析平台 (TCMSP, <http://ibts.hkbu.edu.hk/LSP/tcmsp.php>), SwissTarget (<http://www.swisstargetprediction.ch/>), 中药整合药理学平台 (TCMIP, <http://www.tcmip.cn/>), PharmMapper 数据库 (<http://lilab.ecust.edu.cn/pharmmapper/index.php>) 等。

②从疾病数据库或组学数据中获取疾病相关靶点蛋白。常用的疾病相关靶点数据库有 DisGeNET^[80]、GeneCards^[81]、Therapeutic Target Database(TTD)^[82]、DrugBank^[83]、Online Mendelian Inheritance in Man (OMIM)^[84]等。但是, 迄今尚未有化妆品功效和靶点的公共数据库。需要完成基于功效靶点的网络药理学分析, 就需要有功效靶点数据库。针对化妆品与护肤领域, 国内也有机构构建皮肤功效靶点数据库 (SkinEfficacyTarget数据库, 欧易生物, 上海)。SkinEfficacyTarget数据库是一个关于皮肤功效靶点信息的全面性数据库。该数据库收集了关于皮肤功效靶点的大量信息, 包括已知的皮肤功效靶点、相应功效、靶点的作用方式、相应小分子化合物和天然产物等。其信息来源包括文献报道、专利信息、临床试验数据及积累的国人皮肤组学检测数据等, 并采用专家评估、文献审核等多种方式进行数据筛选和验证。

③分析各要素间的相互关系, 对获取的药物和疾病共有蛋白进行药理机制和功能预测。构建药物-成分-靶点-功能-疾病多元相互作用网络。功能注释常用 GO 和 KEGG 数据库; 相互作用网络分析常用 STRING^[85]、GeneMANIA^[86]、Molecular INTeraction database (MINT)^[87]和 SwissTargetPrediction^[88]等。

通过网络药理学分析筛选得到的关键活性成分和核心靶点蛋白可以进行分子对接及功能实验验证。

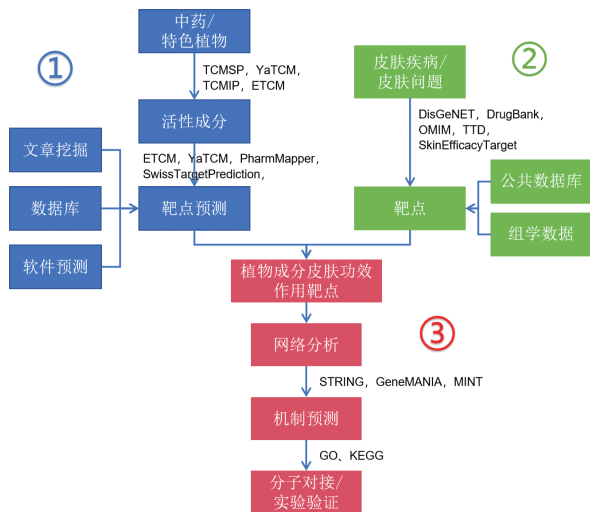


图1、网络药理学整体研究思路^[79]

3.分子对接

3.1 分子对接的定义

分子对接 (molecular docking) 是通过计算机模拟方法研究分子间的相互作用, 将化合物“对接”到生物靶标的结构中, 预测每种化合物的结合紧密度及其结合时的几何形状, 评估分子与靶标结合位点的契合度。分子对接不仅可以揭示配体 (即已知与特定生物靶标结合的分子) 影响靶标功能的结构机制, 还可以帮助进行配体优化, 寻找更理想特性的化合物 (结合力更强, 疗效更高, 副作用更少)^[89]。作为化学计算方法, 分子对接因其可预测性、可重复性和经济性, 广泛应用于药效模拟与新药开发研究, 可以更加经济高效地预测极具活性潜力的成分结构, 大大降低研发的周期和成本^[90]。

3.2 分子对接分析方法

化妆品特色植物大多数都是中草药, 同样具有多成分、多靶点以及多途径发挥作用的特点。网络药理学分析可以构建药物-成分-靶点-功能-疾病多元相互作用网络, 找到天然活性成分与潜在蛋白靶点的互作关系。在此基础上, 分子对接可以从微观角度出发, 模拟天然产物与靶点蛋白的空间结合构象, 为后续的功能验证提供有力支撑。分子对接基本分为3个步骤: 构建蛋白质和小分子的三维结构、生成构象库和评估得分^[90]。整个分析过程都可以通过软件或者算法来自动完成, 目前常用的分子对接软件汇总如下, 详见表4。

表4 分子对接相关软件和算法 ^[90]		
软件/算法	基本情况介绍	文献
AutoDock	由 AutoGrid 和 AutoDock 两个程序组成。应用半柔性对接方法, 采用拉马克遗传搜索算法和基于经验的打分函数进行分析。	[91]
AutoDock Vina	通过使用更简单的打分函数加快运行速度, 可在多核处理器上并行运算。	[92]
Sybyl	Sybyl是商业平台, 集成了分子对接、药效团识别、虚拟筛选、定量构效关系、组合化学、同源建模等多个模块。	[93]
Discovery studio	商业平台, 基于 BIOVIA Pipeline Pilot构建的面向生命科学领域的综合分子建模和模拟平台。包含32个计算模块, 涉及大分子和小分子等多种体系。	[94]
Maestro	商业平台, 提供了直观、高级的图形用户界面, 用于发现分子见解和访问集成解决方案。	
Glide	提供全方位的速度与精度选项, 既有用于高效丰富数百万化合物库的高通量虚拟筛选模式, 又有用于可靠对接数万至数十万化合物库的标准精度模式。	[95]

续表4

软件 / 算法	基本情况介绍	文献
Flex X	采用碎片生长方式搜索到最优构象，依据对接自由能的大小选取最优构象。	[96]
LeDock	可快速准确地将小分子灵活对接到蛋白质，可通过高通量虚拟筛选筛选激酶抑制剂和结构域拮抗剂。	[97]
rDock	开源对接程序，主要用于小分子与蛋白质和核酸的对接，有高通量虚拟筛选和结合模式预测两类功能。	[98]
Surflex	采用独特的经验打分函数和拥有专利的搜索引擎，将配体分子对接到蛋白的结合位点。	[99]
Rosettadock	常用于精细优化结合模式，在已知位点时，限制对接的位点，可以提交相互作用残基与非相互作用残基。	[100]
ZDOCK	基于快速傅里叶变换的刚性蛋白对接程序，可用于预测蛋白分子间的拼合模型。	[101]
FlexPepDock	基于折叠模拟的对接算法，可用于预测多肽与蛋白分子间的拼合模型。	[102]
SwissDock	瑞士生物信息研究所分子建模小组开发的一项免费在线分子对接工具，使用 EADock 分子对接算法，基于二面体空间的采样，根据靶标蛋白和配体的性质，进行快速的计算。	[103]

3.3 网络药理学－分子对接在化妆品特色植物研究中的应用

植物成分复杂，活性成分多种多样，功效也是各有不同，呈现多成分，多靶点，多通路的作用机制。网络药理学－分子对接联合分析广泛应用于植物天然成分研究，筛选活性成分的靶点蛋白，解析植物活性物质功效机理。Deng 等^[104]利用网络药理学、分子对接和细胞动物实验联合解析穿心莲（*Andrographis paniculata*，AP）治疗日光性皮炎（Solar dermatitis，SD）的分子机制，发现汉黄芩素（wogonin，WG）可以作用于 PI3K－Akt 信号通路治疗紫外线照射引发的日光性皮炎。葛根具有抗氧化和抗黑色素生成活性，可以作为皮肤美白剂。通过活性成分的 LC－MS 分析、网络药理学研究、分子对接分析和动物实验，证实葛根中的关键活性物质葛根素和黄豆苷元可以靶向 ACC1 和 PPARG 蛋白，并通过多种途径来调节皮肤脂质代谢^[105]。网络药理学和分子对接还被用于分析菊科植物牛蒡（*Arctium lappa* L.）中的牛蒡子甾元（Arctigenin，ATG），发现 ATG 可以通过作用于 CYP19A1 调节 17β－雌二醇（E2）分泌，最终抑制 NLRP3 炎性小体信号通路并改善痤疮小鼠的炎症水平^[106]。Kc 等^[107]探讨了四君子汤（SJZT）抗皮肤衰老功效的分子机理，通过 LC－MS 成分分析、网络药理学和分子对接分析发现甘草甜素、人参皂苷 Rg5、人参皂苷 Rh2、甘草素、多孔酸 C 和白术内酯 II 可以

靶向 p38/p53 信号通路，调控皮肤衰老过程。

4. 组学技术在皮肤科学研究领域中的进展

组学技术是系统生命科学的重要手段，能够动态地揭示系统结构、功能相互作用和运行规律。目前主要的高通量组学分析技术包括基因组学、表观组学、转录组学、蛋白质组学和代谢组学。利用组学技术可以在一个样本中同时分析几千甚至上万个基因、蛋白质或代谢物，可以从全局角度了解皮肤中基因表达、蛋白质和代谢物丰度变化，全面解析皮肤生命活动的奥秘。

4.1 组学技术与皮肤基础科学研究

在皮肤和化妆品领域，皮肤状态与问题的机理研究是化妆品开发的基础和前提。通过物理、化学及生物学技术对皮肤进行多部位、多层面研究，了解表面现象或皮肤问题发生的原因，分析相关物质及调控通路的变化，可以为相关功效原料的开发和产品设计提供技术与数据支撑^[108]。

近年来，组学技术，尤其是基于质谱技术的蛋白组学和代谢组学在皮肤基础研究领域得到了广泛的认可，已成为解析皮肤疾病与衰老过程分子机理的重要工具。Emmert 等^[109]对 10 名成年特应性皮炎患者和 10 名健康志愿者的皮肤胶条（tape strips）进行代谢组学分析，发现特应性皮炎患者脂质代谢物组成显著改变，且特征脂质的变化与皮肤微生物组改变显著相关。Kuehne 等^[110]利用转录组和代谢组学方法分析年轻和老年人表皮组织样本，全面解析了人体皮肤衰老过程中的代谢变化及其转录调控机制，为年龄相关皮肤病治疗提供了数据资源。Marathe 等^[111]对 IL－9 刺激的人原代角质形成细胞（KCs）进行蛋白组学和代谢组学检测，发现 IL－9 通过调节中枢碳水化合物代谢和破坏电子传递链（ETC）来引发代谢重编程，还会抑制毒性 ROS 的产生，减少细胞凋亡，提高细胞存活率。此外，组学技术还被用于研究外界环境暴露对皮肤的影响。Jacques 等^[112]使用原始重建人类表皮（RHE）模型评估阳光照射对皮肤的影响，他们发现几种天然保湿因子：氨基酸、乳酸、甘油、尿酸、吡咯烷酮羧酸及其衍生物，均发生显著变化，这可能引发皮肤通透性屏障损伤、脱水和对阳光的炎症反应。Misra 等^[113]分析了两个不同污染水平城市女性面部皮肤表面的蛋白组学，代谢组学及微生物组学特征，发现这些特征与生活在污染环境个体的皮肤色素沉着功能障碍存在显著关联。Tilton 等^[114]利用体外 3D 人体全层皮肤模型

研究低剂量辐射暴露对皮肤的影响,通过转录组学、蛋白质组学、磷酸化蛋白质组学和代谢组学研究发现辐射引发DNA修复、组织重塑和细胞增殖抑制等功能急剧增强,揭示了受辐射影响的相关信号转导机制,为研究人体组织调控辐射反应机制提供了新的见解。

4.2 组学技术与植物活性成分机理研究

在皮肤和化妆品领域,组学技术不仅用于解析皮肤问题的病理机制,还被用于解析化妆品及其活性成分的功效机制,尤其是化妆品特色植物天然成分的研究。通过多组学技术,分析原料活性成分,了解化妆品或活性成分的靶向途径,确定分子作用机理,可以为化妆品新原料、新配方、新产品的功能机制研究提供新思路。

Du等^[115]发现含黄芪多糖的3D打印支架对大鼠创伤性皮肤有更好的修复作用,新生皮肤蛋白组学发现黄芪多糖3D打印支架可能通过STAT3激活YAP/TAZ信号通路,促进VEGFs表达,加速创伤的早期血管生成,纠正创伤的蛋白紊乱,最终实现伤口的修复。Mahendra等^[116]利用蛋白组学研究大叶桃花心木(*Swietenia macrophylla* King)种子提取物对UVB损伤皮肤的修复作用,发现受到UVB照射影响的氧化还原系统、DNA修复和维持、RNA转录到翻译、蛋白质维持和合成、细胞生长迁移和增殖、糖酵解以及炎症和凋亡相关通路被逆转,显示出大叶桃花心种子提取物的光保护特性,可作为潜在的化妆品原料。Liu等^[117]利用转录组学和蛋白组学联合分析研究5种植物提取物(羊蹄甲、赤芍、白芷、菖蒲、独活)对糖尿病足溃疡的治疗作用,发现混合草药提取物可以影响自噬、PI3-Akt和mTOR等信号通路促进血管生成、M2巨噬细胞增殖和胶原蛋白合成,实现皮肤伤口的愈合。Zhao等^[118]运用单细胞转录组技术,分析了具有延缓衰老活力的天然产物槲皮素处理后的小鼠皮肤,发现槲皮素可以通过激活毛囊微环境内皮细胞中HIF-1通路来促进毛发再生,为槲皮素治疗脱发的转化医学应用提供了科学依据。Yuan等^[119]通过转录组学、蛋白组学和代谢组学联合分析研究天然产物雷公藤红素抗金黄色葡萄球菌(MRSA)感染的分子机理,证实雷公藤红素通过靶向 $\Delta 1$ -吡咯啉-5-羧酸脱氢酶诱导氧化应激并抑制DNA合成,从而改善小鼠的MRSA皮肤感染,提高MRSA菌血症模型的存活率。Hu等^[120]利用成分分析和网络药理学研究并结合小鼠模型皮肤组织转录组学和蛋白组学分析,系统解析升麻-土茯苓治疗银屑病的分子机制,发现升麻-土茯苓可以通过减少MAPK通路介

导的细胞因子和趋化因子的表达来缓解咪喹莫特诱导的银屑病样皮炎,改善体内氨基酸和肉碱代谢。Wang等^[121]在对火麻仁乙醇提取物成分分析的基础上,结合细胞实验,小鼠模型实验及单细胞转录和蛋白组学数据,发现火麻仁中的天然产物——三油酸甘油酯(Trilinolein)可以通过调控AhR-Nrf2信号轴改善线粒体功能障碍,发挥预防特异性皮炎复发的功效。Wu等^[122]利用成分分析,网络药理学,分子对接结合小鼠模型皮肤组织蛋白组学研究Si Cao Formula(SCF)对银屑病的治疗机制,发现SCF中的天然成分甘草素、细小黄酮B、甘氨酸豆素、8-异戊烯基叶酮、甘草查尔酮A、甘草查尔酮B、氧化马碱和13-羟基羽扇氨酸,可以分别靶向雌激素信号通路中的MAP2K1、ILK、HDAC1和PRKACA等蛋白,发挥治疗功效。

5. 结语与展望

目前,植物提取物广泛应用于各种类型的化妆品中,既有清洁型、香用型化妆品,也有护肤型化妆品。以植物天然产物为原料的化妆品已经成为了化妆品行业的明星产品。明确化妆品植物原料中的天然产物成分及其功效机制,不仅关乎化妆品的质量和安全性,还可增强消费者的信任度和满意度,这就需要科学的技术和手段来进行深入的解析。基于质谱技术广谱、高效的解析植物天然产物成分,通过网络药理学和分子对接明确天然成分的功效靶点蛋白,利用多组学技术系统解析植物提取物/天然成分功效机理,三者整合形成的“成分分析-网络药理学-分子对接-组学功效挖掘”植物天然成分研究体系可完美覆盖植物源化妆品研究的全流程,缩短化妆品研发时间,为化妆品开发提供了新的技术支撑。

参考文献

- [1] 沈耐涛,袁欢,林庆斌,等. 全球主要生产国家和地区化妆品法规中植物类原料的相关规定[J]. 中国中药杂志, 2019, 44(24): 5488-5495.
- [2] Durazzo A, Lucarini M, Souto EB, Cicala C, Caiazzo E, Izzo AA, Novellino E, Santini A. Polyphenols: A concise overview on the chemistry, occurrence, and human health[J]. Phytother Res. 2019 Sep;33(9):2221-2243.
- [3] Bharadvaja N, Gautam S, Singh H. Natural polyphenols: a promising bioactive compounds for skin care and cosmetics[J]. Mol Biol Rep. 2023 Feb;50(2):1817-1828.
- [4] 陈斌. 植物多糖在化妆品中的应用研究进展[J]. 中国野生植物

资源, 2020,39(04): 44–47.

[5] Stepińska A, Ciepińska P, Fac W, Górka J. Selected Alkaloids Used in the Cosmetics Industry[J]. J Cosmet Sci. 2021 Mar–Apr;72(2):229–245.

[6] Câmara JS, Perestrelo R, Ferreira R, Berenguer CV, Pereira JAM, Castilho PC. Plant-Derived Terpenoids: A Plethora of Bioactive Compounds with Several Health Functions and Industrial Applications—A Comprehensive Overview[J]. Molecules. 2024 Aug 15;29(16):3861.

[7] Björklund G, Shanida M, Lysiuk R, Butnariu M, Peana M, Sarac I, Strus O, Smetanina K, Chirumbolo S. Natural Compounds and Products from an Anti-Aging Perspective[J]. Molecules. 2022 Oct 20;27(20):7084.

[8] Kalaivani T, Mathew L. Free radical scavenging activity from leaves of *Acacia nilotica* (L.) Wild. ex Delile, an Indian medicinal tree[J]. Food Chem Toxicol. 2010 Jan;48(1):298–305.

[9] Haliloglu Y, Ozek T, Tekin M, et al. Phytochemicals, antioxidant, and antityrosinase activities of *Achillea sivasica* Çelik and Akpulat[J]. International Journal of Food properties. 2017 Dec;20:S693–S706.

[10] Zielińska S, Matkowski A. Phytochemistry and bioactivity of aromatic and medicinal plants from the genus *Agastache* (Lamiaceae)[J]. Phytochem Rev. 2014;13(2):391–416.

[11] Sabale V, Kunjwani H, Sabale P. Formulation and in vitro evaluation of the topical antiageing preparation of the fruit of *Benincasa hispida*[J]. J Ayurveda Integr Med. 2011 Jul;2(3):124–8.

[12] Oyeta White P, Tribout H, Baron E. Protective mechanisms of green tea polyphenols in skin[J]. Oxid Med Cell Longev. 2012;2012:560682.

[13] Kim YJ, Cha HJ, Nam KH, Yoon Y, Lee H, An S. Centella asiatica extracts modulate hydrogen peroxide-induced senescence in human dermal fibroblasts[J]. Exp Dermatol. 2011 Dec;20(12):998–1003.

[14] Affonso RC, Voyten AP, Fanan S, Pitz H, Coelho DS, Horstmann AL, Pereira A, Uarrota VG, Hillmann MC, Varela LA, Ribeiro-do-Valle RM, Maraschin M. Phytochemical Composition, Antioxidant Activity, and the Effect of the Aqueous Extract of Coffee (*Coffea arabica* L.) Bean Residual Press Cake on the Skin Wound Healing[J]. Oxid Med Cell Longev. 2016;2016:1923754.

[15] Park G, Kim HG, Kim YO, Park SH, Kim SY, Oh MS. *Coriandrum sativum* L. protects human keratinocytes from oxidative stress by regulating oxidative defense systems[J]. Skin Pharmacol Physiol. 2012;25(2):93–9.

[16] Jurikova T, Sochor J, Rop O, Mlcek J, Balla S, Szekeres L, Adam V, Kizek R. Polyphenolic profile and biological activity of Chinese hawthorn (*Crataegus pinnatifida* BUNGE) fruits[J]. Molecules. 2012 Dec 6;17(12):14490–509.

[17] Moon HI, Kim TI, Cho HS, Kim EK. Identification of potential and selective collagenase, gelatinase inhibitors from *Crataegus pinnatifida*[J]. Bioorg Med Chem Lett. 2010 Feb 1;20(3):991–3.

[18] Panahi Y, Fazlollahzadeh O, Atkin SL, Majeed M, Butler AE, Johnston TP, Sahebkar A. Evidence of curcumin and curcumin analogue

effects in skin diseases: A narrative review[J]. J Cell Physiol. 2019 Feb;234(2):1165–1178.

[19] Perrone D, Ardito F, Giannatempo G, Dioguardi M, Troiano G, Lo Russo L, DE Lillo A, Laino L, Lo Muzio L. Biological and therapeutic activities, and anticancer properties of curcumin[J]. Exp Ther Med. 2015 Nov;10(5):1615–1623.

[20] Petrova A, Davids LM, Rautenbach F, Marnewick JL. Photoprotection by honeybush extracts, hesperidin and mangiferin against UVB-induced skin damage in SKH-1 mice[J]. J Photochem Photobiol B. 2011 May 3;103(2):126–39.

[21] Chaikul P, Kanlayavattanakul M, Somkumnerd J, Lourith N. *Phyllanthus emblica* L. (amla) branch: A safe and effective ingredient against skin aging[J]. J Tradit Complement Med. 2021 Feb 9;11(5):390–399.

[22] Moreira LC, de Ávila RI, Veloso DFMC, Pedrosa TN, Lima ES, do Couto RO, Lima EM, Batista AC, de Paula JR, Valadares MC. In vitro safety and efficacy evaluations of a complex botanical mixture of *Eugenia dysenterica* DC. (Myrtaceae): Prospects for developing a new dermocosmetic product[J]. Toxicol In Vitro. 2017 Dec;45(Pt 3):397–408.

[23] He W, Huang B. A review of chemistry and bioactivities of a medicinal spice: *Foeniculum vulgare*[J]. Journal of Medicinal Plant Research, 2011, 5:3595–3600.

[24] Gasparrini M, Forbes-Hernandez TY, Afrin S, Reboredo-Rodríguez P, Cianciosi D, Mezzetti B, Quiles JL, Bompadre S, Battino M, Giampieri F. Strawberry-Based Cosmetic Formulations Protect Human Dermal Fibroblasts against UVA-Induced Damage[J]. Nutrients. 2017 Jun 14;9(6):605.

[25] Kwon DJ, Bae YS, Ju SM, Goh AR, Choi SY, Park J. Casuarinin suppresses TNF- α -induced ICAM-1 expression via blockade of NF- κ B activation in HaCaT cells[J]. Biochem Biophys Res Commun. 2011 Jun 17;409(4):780–5.

[26] Hwang IS, Kim JE, Choi SI, Lee HR, Lee YJ, Jang MJ, Son HJ, Lee HS, Oh CH, Kim BH, Lee SH, Hwang DY. UV radiation-induced skin aging in hairless mice is effectively prevented by oral intake of sea buckthorn (*Hippophae rhamnoides* L.) fruit blend for 6 weeks through MMP suppression and increase of SOD activity[J]. Int J Mol Med. 2012 Aug;30(2):392–400.

[27] Myung DB, Han HS, Shin JS, Park JY, Hwang HJ, Kim HJ, Ahn HS, Lee SH, Lee KT. Hydrangenol Isolated from the Leaves of *Hydrangea serrata* Attenuates Wrinkle Formation and Repairs Skin Moisture in UVB-Irradiated Hairless Mice[J]. Nutrients. 2019 Oct 2;11(10):2354.

[28] Myung DB, Lee JH, Han HS, Lee KY, Ahn HS, Shin YK, Song E, Kim BH, Lee KH, Lee SH, Lee KT. Oral Intake of *Hydrangea serrata* (Thunb.) Ser. Leaves Extract Improves Wrinkles, Hydration, Elasticity, Texture, and Roughness in Human Skin: A Randomized, Double-Blind, Placebo-Controlled Study[J]. Nutrients. 2020 May 28;12(6):1588.

[29] Zhu X, Zeng X, Zhang X, Cao W, Wang Y, Chen H, Wang T, Tsai HI, Zhang R, Chang D, He S, Mei L, Shi X. The effects of quercetin-

loaded PLGA-TPGS nanoparticles on ultraviolet B-induced skin damages in vivo[J]. *Nanomedicine*. 2016 Apr;12(3):623-632.

[30] Wen KC, Chiu HH, Fan PC, Chen CW, Wu SM, Chang JH, Chiang HM. Antioxidant activity of *Ixora parviflora* in a cell/cell-free system and in UV-exposed human fibroblasts[J]. *Molecules*. 2011 Jul 6;16(7):5735-52.

[31] Chiang HM, Chen HC, Lin TJ, Shih IC, Wen KC. *Michelia alba* extract attenuates UVB-induced expression of matrix metalloproteinases via MAP kinase pathway in human dermal fibroblasts[J]. *Food Chem Toxicol*. 2012 Dec;50(12):4260-9.

[32] Wang HM, Chen CY, Chen CY, Ho ML, Chou YT, Chang HC, Lee CH, Wang CZ, Chu IM. (-)-N-Formylanonaine from *Michelia alba* as a human tyrosinase inhibitor and antioxidant[J]. *Bioorg Med Chem*. 2010 Jul 15;18(14):5241-7.

[33] Park SH, Yi YS, Kim MY, Cho JY. Antioxidative and Antimelanogenesis Effect of *Momordica charantia* Methanol Extract[J]. *Evid Based Complement Alternat Med*. 2019 May 2;2019:5091534.

[34] Cho Y, Kim KH, Shim JS, Hwang JK. Inhibitory effects of macelignan isolated from *Myristica fragrans* HOUTT. on melanin biosynthesis[J]. *Biol Pharm Bull*. 2008 May;31(5):986-9.

[35] Kang TH, Park HM, Kim YB, Kim H, Kim N, Do JH, Kang C, Cho Y, Kim SY. Effects of red ginseng extract on UVB irradiation-induced skin aging in hairless mice[J]. *J Ethnopharmacol*. 2009 Jun 25;123(3):446-51.

[36] Lee HJ, Kim JS, Song MS, Seo HS, Moon C, Kim JC, Jo SK, Jang JS, Kim SH. Photoprotective effect of red ginseng against ultraviolet radiation-induced chronic skin damage in the hairless mouse[J]. *Phytother Res*. 2009 Mar;23(3):399-403.

[37] Jeong D, Park SH, Kim MH, Lee S, Cho YK, Kim YA, Park BJ, Lee J, Kang H, Cho JY. Anti-Melanogenic Effects of Ethanol Extracts of the Leaves and Roots of *Patrinia villosa* (Thunb.) Juss through Their Inhibition of CREB and Induction of ERK and Autophagy[J]. *Molecules*. 2020 Nov 17;25(22):5375.

[38] Jeong D, Lee J, Park SH, Kim YA, Park BJ, Oh J, Sung GH, Aravinthan A, Kim JH, Kang H, Cho JY. Antiphotaging and Antimelanogenic Effects of *Penthorum chinense* Pursh Ethanol Extract due to Antioxidant- and Autophagy-Inducing Properties[J]. *Oxid Med Cell Longev*. 2019 Apr 3;2019:9679731.

[39] Parrado C, Mascaraque M, Gilaberte Y, Juarranz A, Gonzalez S. Fernblock (*Polypodium leucotomos* Extract): Molecular Mechanisms and Pleiotropic Effects in Light-Related Skin Conditions, Photoaging and Skin Cancers, a Review[J]. *Int J Mol Sci*. 2016 Jun 29;17(7):1026.

[40] Spagnol CM, Di Filippo LD, Isaac VLB, Correa MA, Salgado HRN. Caffeic Acid in Dermatological Formulations: In Vitro Release Profile and Skin Absorption[J]. *Comb Chem High Throughput Screen*. 2017;20(8):675-681.

[41] Turrini E, Ferruzzi L, Fimognari C. Potential Effects of Pomegranate Polyphenols in Cancer Prevention and Therapy[J]. *Oxid Med Cell Longev*. 2015;2015:938475.

[42] Gabr SA, Alghadir AH. Evaluation of the Biological Effects of

Lyophilized Hydrophilic Extract of *Rhus coriaria* on Myeloperoxidase (MPO) Activity, Wound Healing, and Microbial Infections of Skin Wound Tissues[J]. *Evid Based Complement Alternat Med*. 2019 Jul 14;2019:5861537.

[43] Nozza E, Melzi G, Marabini L, Marinovich M, Piazza S, Khalilpour S, Dell' Agli M, Sangiovanni E. *Rhus coriaria* L. Fruit Extract Prevents UV-A-Induced Genotoxicity and Oxidative Injury in Human Microvascular Endothelial Cells[J]. *Antioxidants (Basel)*. 2020 Apr 1;9(4):292.

[44] Lee MH, Lin YP, Hsu FL, Zhan GR, Yen KY. Bioactive constituents of *Spatholobus suberectus* in regulating tyrosinase-related proteins and mRNA in HEMn cells[J]. *Phytochemistry*. 2006 Jun;67(12):1262-70.

[45] Scapagnini G, Davinelli S, Di Renzo L, De Lorenzo A, Olarte HH, Micali G, Cicero AF, Gonzalez S. Cocoa bioactive compounds: significance and potential for the maintenance of skin health[J]. *Nutrients*. 2014 Aug 11;6(8):3202-13.

[46] 谢田伟. 枇杷花黄酮与精油的提取及其性质分析研究 [D]. 厦门: 集美大学, 2012.

[47] 纪亮, 秦树艳, 雷敬卫, 等. 甘草汁炮制栀子红外光谱及抗氧化活性谱效关系研究 [J]. *时珍国医国药*, 2021, 32 (9) : 2150.

[48] XIE Chuanqi, XU Ning, SHAO Yongni, et al. Using FT-NIR spectroscopy technique to determine arginine content in fermented *Cordyceps sinensis* mycelium[J]. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2015, 149: 971.

[49] Marchetti L, Brighenti V, Rossi MC, Sperlea J, Pellati F, Bertelli D. Use of ¹³C-qNMR Spectroscopy for the Analysis of Non-Psychoactive Cannabinoids in Fibre-Type Cannabis sativa L. (Hemp)[J]. *Molecules*. 2019 Mar 22;24(6):1138.

[50] Li C, Dong Z, Zhang B, Huang Q, Liu G, Fu X. Structural characterization and immune enhancement activity of a novel polysaccharide from *Moringa oleifera* leaves[J]. *Carbohydr Polym*. 2020 Apr 15;234:115897.

[51] Gholkar MS, Li JV, Daswani PG, Tetali P, Birdi TJ. 1H nuclear magnetic resonance-based metabolite profiling of guava leaf extract: an attempt to develop a prototype for standardization of plant extracts[J]. *BMC Complement Med Ther*. 2021 Mar 18;21(1):95.

[52] Hrichi S, Chaâbane-Banaoues R, Hrichi H, Belgacem S, Babba O, Flamini G, Babba H. Chemical composition and antifungal efficacy of Tunisian *Prunus armeniaca* L. kernels with formulation of an antidermatophyte cream based on kernel powder[J]. *Fitoterapia*. 2024 Sep 26;179:106223.

[53] Popoola OK, Marnewick JL, Iwuoha EI, Hussein AA. Methoxylated Flavonols and ent-Kaurane Diterpenes from the South African *Helichrysum rutilans* and Their Cosmetic Potential[J]. *Plants (Basel)*. 2023 Aug 4;12(15):2870.

[54] 张小艺. 市场主流藁本类药材的差异性评价及谱效关系研究 [D]. 北京: 北京协和医学院, 2020.

[55] Muzykiewicz-Szymańska A, Nowak A, Kucharska E, Cybulska K, Klimowicz A, Kucharski Ł. *Sanguisorba officinalis* L. ethanolic

- extracts and essential oil – chemical composition, antioxidant potential, antibacterial activity, and ex vivo skin permeation study[J]. *Front Pharmacol*. 2024 Sep 2;15:1390551.
- [56] Sajid R, Abbas Z, Nazir M, Saleem M, Riaz N, Tousif MI, Tauseef S, Zengin G, Uba AI, Hussain AI, Ali MS, Hashem A, Almutairi KF, Avila-Quezada GD, Abd Allah EF. Valorization of hydro-distillate of fruit peels of *Citrus paradisi* macfad. Cultivar. Foster: Chemical profiling, antioxidant evaluation and in vitro and in silico enzyme inhibition studies[J]. *Heliyon*. 2024 Aug 21;10(17):e36226.
- [57] Huang YH, Huang CY. Anti-Skin Aging Potential, Antibacterial Activity, Inhibition of Single-Stranded DNA-Binding Protein, and Cytotoxic Effects of Acetone-Extracted *Passiflora edulis* (Tainung No. 1) Rind Extract on Oral Carcinoma Cells[J]. *Plants (Basel)*. 2024 Aug 8;13(16):2194.
- [58] Wu M, Yang P, Wang J, Yang R, Chen Y, Liu K, Yuan Y, Zhang L. Characterization of the Components and Metabolites of *Achyranthes Bidentata* in the Plasma and Brain Tissue of Rats Based on Ultrahigh Performance Liquid Chromatography–High-Resolution Mass Spectrometry (UHPLC–HR–MS)[J]. *Molecules*. 2024 Jun 14;29(12):2840.
- [59] Song X, Wang W, Liu L, Zhao Z, Shen X, Zhou L, Zhang Y, Peng D, Nian S. *Poria cocos* Attenuated DSS-Induced Ulcerative Colitis via NF- κ B Signaling Pathway and Regulating Gut Microbiota[J]. *Molecules*. 2024 May 6;29(9):2154.
- [60] Pan Y, Ming K, Guo D, Liu X, Deng C, Chi Q, Liu X, Wang C, Xu K. Non-targeted metabolomics and explainable artificial intelligence: Effects of processing and color on coniferyl aldehyde levels in *Eucommiae cortex*[J]. *Food Chem*. 2024 Dec 1;460(Pt 2):140564.
- [61] Sorokina M, Steinbeck C. Review on natural products databases: where to find data in 2020[J]. *J Cheminform*. 2020 Apr 3;12(1):20.
- [62] Chen CY. TCM Database@Taiwan: the world's largest traditional Chinese medicine database for drug screening in silico[J]. *PLoS One*. 2011 Jan 6;6(1):e15939.
- [63] Huang J, Zheng Y, Wu W, Xie T, Yao H, Pang X, Sun F, Ouyang L, Wang J. CEMTDD: The database for elucidating the relationships among herbs, compounds, targets and related diseases for Chinese ethnic minority traditional drugs[J]. *Oncotarget*. 2015 Jul 10;6(19):17675–84.
- [64] Qiao X, Hou T, Zhang W, Guo S, Xu X. A 3D structure database of components from Chinese traditional medicinal herbs[J]. *J Chem Inf Comput Sci*. 2002 May–Jun;42(3):481–9.
- [65] Xu HY, Zhang YQ, Liu ZM, Chen T, Lv CY, Tang SH, Zhang XB, Zhang W, Li ZY, Zhou RR, Yang HJ, Wang XJ, Huang LQ. ETCM: an encyclopaedia of traditional Chinese medicine[J]. *Nucleic Acids Res*. 2019 Jan 8;47(D1):D976–D982.
- [66] Shen J, Xu X, Cheng F, Liu H, Luo X, Shen J, Chen K, Zhao W, Shen X, Jiang H. Virtual screening on natural products for discovering active compounds and target information[J]. *Curr Med Chem*. 2003 Nov;10(21):2327–42.
- [67] Xue R, Fang Z, Zhang M, Yi Z, Wen C, Shi T. TCMID: Traditional Chinese Medicine integrative database for herb molecular mechanism analysis[J]. *Nucleic Acids Res*. 2013 Jan;41(Database issue):D1089–95.
- [68] Ru J, Li P, Wang J, Zhou W, Li B, Huang C, Li P, Guo Z, Tao W, Yang Y, Xu X, Li Y, Wang Y, Yang L. TCMSP: a database of systems pharmacology for drug discovery from herbal medicines[J]. *J Cheminform*. 2014 Apr 16;6:13.
- [69] Li B, Ma C, Zhao X, Hu Z, Du T, Xu X, Wang Z, Lin J. YaTCM: Yet another Traditional Chinese Medicine Database for Drug Discovery[J]. *Comput Struct Biotechnol J*. 2018 Nov 23;16:600–610.
- [70] 张柳, 王丽瑶, 张凯雪, 等. 应用于天然产物研究与开发的代谢组学数据库[J]. *化学分析计量*, 2019,28(5):128–134.
- [71] 罗红情, 胡波. MS 在测定天然产物中的研究进展[J]. *广州化工*, 2012, 40(2): 57–58.
- [72] WANG M X, CARVER J J, PHELAN V V, et al. Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking Nature[J]. *Nature biotechnology*, 2016, 34(8): 828–837.
- [73] HORAI H, ARITA M, KANAYA S, et al. MassBank: a public repository for sharing mass spectral data for life sciences[J]. *Journal of mass spectrometry*, 2010, 45: 703–714.
- [74] GUIJAS C, MONTENEGRO-BURKE J R, DOMINGO-ALMENARA X, et al. METLIN: a technology platform for identifying knowns and unknowns[J]. *Analytical chemistry*, 2018, 90: 3156–3164.
- [75] SAWADA Y, NAKABAYASHI R, YAMADA Y, et al. RIKEN tandem mass spectral database(ReSpect) for phytochemicals: a plant-specific MS / MS-based data resource and database[J]. *Phytochemistry*, 2012, 82: 38–45.
- [76] QIU F, FINE D D, WHERRITT, D J, et al. PlantMAT: a metabolomics tool for predicting the specialized metabolic potential of a system and for large-scale metabolite identifications[J]. *Analytical chemistry*, 2016, 88: 11 373–11 383.
- [77] Hopkins AI. Network pharmacology[J]. *Nat Biotechnol*, 2007, 25 (10) : 1110–1111.
- [78] 庄延双, 蔡宝昌, 张自力. 网络药理学在中药研究中的应用进展[J]. *南京中医药大学学报*, 2021, 37(1): 156–160.
- [79] 陈健, 陈启龙. 网络药理学在中医药研究中的现状及思考[J]. *上海中医药大学学报*, 2021,35(5):1–6,13.
- [80] PIÑERO J, RAMÍREZ-ANGUITA J M, SAÜCH-PITARCH J, et al. The DisGeNET knowledge platform for disease genomics: 2019 update[J]. *Nucleic Acids Res*, 2020, 48(D1): D845–D855.
- [81] STELZER G, ROSEN N, PLASCHKES I, et al. The GeneCards Suite: From Gene Data Mining to Disease Genome Sequence Analyses[J]. *Curr Protoc Bioinformatics*, 2016, 54: 1.30.1–1.30.33.
- [82] WANG Y X, ZHANG S, LI F C, et al. Therapeutic target database 2020: enriched resource for facilitating research and early development of targeted therapeutics[J]. *Nucleic Acids Res*, 2020, 48(D1): D1031–D1041.
- [83] WISHART D S, FEUNANG Y D, GUO A C, et al. DrugBank

- 5.0: a major update to the DrugBank database for 2018[J]. *Nucleic Acids Res*, 2018, 46(D1): D1074–D1082.
- [84] AMBERGER J S, BOCCHINI C A, SCOTT A F, et al. OMIM.org: leveraging knowledge across phenotype–gene relationships[J]. *Nucleic Acids Res*, 2019, 47(D1): D1038–D1043.
- [85] SZKLARCZYK D, GABLE A L, LYON D, et al. STRING v11: protein–protein association networks with increased coverage, supporting functional discovery in genome–wide experimental datasets[J]. *Nucleic Acids Res*, 2019, 47(D1): D607–D613.
- [86] WARDE–FARLEY D, DONALDSON S L, COMES O, et al. The GeneMANIA prediction server: biological network integration for gene prioritization and predicting gene function[J]. *Nucleic Acids Res*, 2010, 38(Web Server issue): W214–W220.
- [87] LICATA L, BRIGANTI L, PELUSO D, et al. MINT, the molecular interaction database: 2012 update[J]. *Nucleic Acids Res*, 2012, 40(Database issue): D857–D861.
- [88] Daina A, Michielin O, Zoete V. SwissTargetPrediction: updated data and new features for efficient prediction of protein targets of small molecules[J]. *Nucleic acids research*, 2019, 47(W1): W357–W364.
- [89] Paggi JM, Pandit A, Dror RO. The Art and Science of Molecular Docking[J]. *Annu Rev Biochem*. 2024 Aug;93(1):389–410.
- [90] 杜海涛, 王琳, 丁洁, 等. 分子对接在中药开发的应用现状与挑战[J]. *中国中药杂志*, 2024, 49(3): 671–680. DOI:10.19540/j.cnki.cjmm.20231013.703.
- [91] MORRIS G M, GOODSSELL D S, HALLIDAY R S, et al. Automated docking using a Lamarckian genetic algorithm and an empirical binding free energy function [J]. *J Comput Chem*, 1998, 19(14): 1639.
- [92] EBERHARDT J, SANTOS–MARTINS D, TILLACK A F, et al. AutoDock Vina 1. 2. 0: new docking methods, expanded force field, and python bindings [J]. *J Chem Inf Model*, 2021, 61(8): 3891.
- [93] 谢集照, 吴峥, 徐佳佳. 分子模拟软件 SYBYL 在药物设计实验中的应用 [J]. *山东化工*, 2022, 51(13): 117.
- [94] Jejurikar, Bhagyashree L. and Sachin H. Rohane. Drug Designing in Discovery Studio[J]. *Asian journal of research in chemistry*, 2021, 14(2): 135–138.
- [95] HALGREN T A, MURPHY R B, FRIESNER R A, et al. Glide: a new approach for rapid, accurate docking and scoring. 2. Enrichment factors in database screening [J]. *J Med Chem*, 2004, 47(7): 1750.
- [96] RAREY M, KRAMER B, LENGAUER T, et al. A fast flexible docking method using an incremental construction algorithm[J]. *J Mol Biol*, 1996, 261(3): 470.
- [97] LIU N, XU Z. Using LeDock as a docking tool for computational drug design[J]. *IOP Conf Ser Earth Environ Sci*, 2019, 218: 012143.
- [98] RUIZ–CARMONA S, ALVAREZ–GARCIA D, FOLOPPE N, et al. rDock: a fast, versatile and open source program for docking ligands to proteins and nucleic acids [J]. *PLoS Comput Biol*, 2014, 10(4): e1003571.
- [99] SPITZER R, JAIN A N. Surflex–Dock: docking benchmarks and real–world application[J]. *J Comput Aided Mol Des*, 2012, 26 (6): 687.
- [100] LYSKOV S, GRAY J J. The RosettaDock server for local proteinprotein docking[J]. *Nucleic Acids Res*, 2008, 36: W233.
- [101] PIERCE B G, WIEHE K, HWANG H, et al. ZDOCK server: interactive docking prediction of protein–protein complexes and symmetric multimers[J]. *Bioinformatics*, 2014, 30(12): 1771.
- [102] RAVEH B, LONDON N, ZIMMERMAN L, et al. Rosetta FlexPepDock abinitio: simultaneous folding, docking and refinement of peptides onto their receptors [J]. *PLoS ONE*, 2011, 6(4): e18934.
- [103] GROSDIDIER A, ZOETE V, MICHIELN O. SwissDock, a protein–small molecule docking web service based on EADock DSS [J]. *Nucleic Acids Res*, 2011, 39(suppl): W270.
- [104] Deng Q, Chen W, Deng B, Chen W, Chen L, Fan G, Wu J, Gao Y, Chen X. Based on network pharmacology, molecular docking and experimental verification to reveal the mechanism of *Andrographis paniculata* against solar dermatitis[J]. *Phytomedicine*. 2024 Sep 7;135:156025.
- [105] Yijie D, Siqi Z, Ruiyin H, Yujing S, Hong M, Yinmao D, Tao Y, Changyong L. Mechanisms of *Puerariae Lobatae Radix* in regulating sebaceous gland secretion: insights from network pharmacology and experimental validation[J]. *Front Pharmacol*. 2024 Jul 24;15:1414856.
- [106] Lu X, Han Y, Zhang Y, Li R, Xu J, Yang J, Yao J, Lv Z. An integrated network pharmacology and molecular docking approach to reveal the role of Arctigenin against *Cutibacterium acnes*–induced skin inflammation by targeting the CYP19A1[J]. *Chem Biol Drug Des*. 2024 Aug;104(2):e14598.
- [107] Ke H, Zhang X, Liang S, Zhou C, Hu Y, Huang Q, Wu J. Study on the anti–skin aging effect and mechanism of Sijunzi Tang based on network pharmacology and experimental validation[J]. *J Ethnopharmacol*. 2024 Oct 28;333:118421.
- [108] 于笑乾, 贾焱, 李钧翔, 等. 生物信息学及数字技术在化妆品领域的应用概况 [J]. *日用化学工业 (中英文)*, 2022, 52(12):1359–1365
- [109] Emmert H, Baurecht H, Thielking F, Stölzl D, Rodriguez E, Harder I, Proksch E, Weidinger S. Stratum corneum lipidomics analysis reveals altered ceramide profile in atopic dermatitis patients across body sites with correlated changes in skin microbiome[J]. *Exp Dermatol*. 2021 Oct;30(10):1398–1408.
- [110] Kuehne A, Hildebrand J, Soehle J, Wenck H, Terstegen L, Gallinat S, Knott A, Winnefeld M, Zamboni N. An integrative metabolomics and transcriptomics study to identify metabolic alterations in aged skin of humans in vivo[J]. *BMC Genomics*. 2017 Feb 15;18(1):169.
- [111] Marathe S, Dhamija B, Kumar S, Jain N, Ghosh S, Dharikar JP, Srinivasan S, Das S, Sawant A, Desai S, Khan F, Syiemlieh A, Munde M, Nayak C, Gandhi M, Kumar A, Srivastava S, Venkatesh KV, Barthel SR, Purwar R. Multiomics Analysis and Systems Biology Integration Identifies the Roles of IL–9 in Keratinocyte Metabolic Reprogramming[J]. *J Invest Dermatol*. 2021 Aug;141(8):1932–1942.
- [112] Jacques C, Jamin EL, Noustens A, Lauze C, Jouanin I, Doat G, Debrauwer L, Bessou–Touya S, Stockfleth E, Duplan H. Multi–omics analysis to evaluate the effects of solar exposure and a broad–spectrum SPF50+ sunscreen on markers of skin barrier function in a

skin ecosystem model[J]. Photochem Photobiol. 2024 Jul 25.

[113] Misra N, Clavaud C, Guinot F, Bourokba N, Nouveau S, Mezzache S, Palazzi P, Appenzeller BMR, Tenenhaus A, Leung MHY, Lee PKH, Bastien P, Aguilar L, Cavusoglu N. Multi-omics analysis to decipher the molecular link between chronic exposure to pollution and human skin dysfunction[J]. Sci Rep. 2021 Sep 15;11(1):18302.

[114] Tilton SC, Matzke MM, Sowa MB, Stenoien DL, Weber TJ, Morgan WF, Waters KM. Data integration reveals key homeostatic mechanisms following low dose radiation exposure[J]. Toxicol Appl Pharmacol. 2015 May 15;285(1):1–11.

[115] Du W, Wang Z, Han M, Zheng Y, Tao B, Pan N, Bao G, Zhuang W, Quan R. Astragalus polysaccharide-containing 3D-printed scaffold for traumatized skin repair and proteomic study[J]. J Cell Mol Med. 2024 Aug;28(16):e70023.

[116] Mahendra CK, Abidin SAZ, Htar TT, Chuah LH, Khan SU, Ming LC, Tang SY, Pusparajah P, Goh BH. Counteracting the Ramifications of UVB Irradiation and Photoaging with Swietenia macrophylla King Seed[J]. Molecules. 2021 Apr 1;26(7):2000.

[117] Liu Y, Zhang X, Yang L, Zhou S, Li Y, Shen Y, Lu S, Zhou J, Liu Y. Proteomics and transcriptomics explore the effect of mixture of herbal extract on diabetic wound healing process[J]. Phytomedicine. 2023 Jul 25;116:154892.

[118] Zhao Q, Zheng Y, Zhao D, Zhao L, Geng L, Ma S, Cai Y, Liu

C, Yan Y, Belmonte JCI, Wang S, Zhang W, Liu GH, Qu J. Single-cell profiling reveals a potent role of quercetin in promoting hair regeneration[J]. Protein Cell. 2023 Jun 7;14(6):398–415.

[119] Yuan Z, Wang J, Qu Q, Zhu Z, Xu M, Zhao M, Sun C, Peng H, Huang X, Dong Y, Dong C, Zheng Y, Yuan S, Li Y. Celastrol Combats Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus by Targeting $\Delta 1$ -Pyrroline-5-Carboxylate Dehydrogenase[J]. Adv Sci (Weinh). 2023 Sep;10(25):e2302459.

[120] Hu X, Qi C, Feng F, Wang Y, Di T, Meng Y, Wang Y, Zhao N, Zhang X, Li P, Zhao J. Combining network pharmacology, RNA-seq, and metabolomics strategies to reveal the mechanism of Cimicifugae Rhizoma-Smilax glabra Roxb herb pair for the treatment of psoriasis[J]. Phytomedicine. 2022 Oct;105:154384.

[121] Wang Y, Lu H, Cheng L, Guo W, Hu Y, Du X, Liu X, Xu M, Liu Y, Zhang Y, Xi R, Wang P, Liu X, Duan Y, Zhu J, Li F. Targeting mitochondrial dysfunction in atopic dermatitis with trilinolein: A triacylglycerol from the medicinal plant Cannabis fructus[J]. Phytomedicine. 2024 Sep;132:155856.

[122] Wu X, Hu S, Jia N, Zhang C, Liu C, Song J, Kuai L, Jiang W, Li B, Chen Q. Accurate network pharmacology and novel ingredients formula of herbal targeting estrogen signaling for psoriasis intervention[J]. J Ethnopharmacol. 2024 Jul 15;329:118099.

The Research System of Plant Natural Products and Efficacy Targets Based on Multi-omics, Bioinformatics, and Molecular Docking

Peng Zhang-xiao, Li Heng, Li Ming-li, Hu Zhe, Jiang Tao, Yang Xiao-de, Chen Chen, Tu Fang-ming, Shu Lie-bo*
(Shanghai Luming biological technology co., LTD. Shanghai 201112)

Abstract : The distinctive plant ingredients in cosmetics possess a high degree of complexity, with a wide variety of natural active products each exerting different effects. Accurately identifying the natural products in plant materials and elucidating the mechanisms of these components have become hot topics in cosmetic research and development. In This paper, we reviewed the current applications of component analysis, network pharmacology, molecular docking, and multi-omics technologies in the fields of dermatology and cosmetics. A research system has been constructed for plant natural products which integrates component analysis, network pharmacology, molecular docking, and efficacy studies by multi-omics. This system demonstrates great potential in efficacy study of plant natural products which provides a new idea for cosmetic research and development.

Keywords : natural products; component analysis; network pharmacology; molecular docking; multi-omics

