**Table S1. A list of active ingredients in HSDTT**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Molecule Name | Molecule formula | CID/MOL ID | Herb |
| Cinnamaldehyde(RG1) | C9H8O | 637511 | rougui |
| cinnamic acid（RG2） | C9H8O2 | 444539 | rougui |
| cinnamic alcohol(RG3) | C9H10O | 5315892 | rougui |
| Cinnamyl acetate（RG4） | C11H12O2 | 5282110 | rougui |
| ethyl cinnamate(RG5) | C11H12O2 | 637758 | rougui |
| 4-methyl salicylaldehyde(WJP1) | C8H8O2 | 61200 | wujiapi |
| agatholic acid(WJP2) | C20H32O3 | 101306703 | wujiapi |
| kaur-16-en-19-oic acid(WJP3) | C20H30O2 | 73062 | wujiapi |
| Savinin(WJP4) | C20H16O6 | 5281867 | wujiapi |
| vitamin A(WJP5) | C20H30O | 445354 | wujiapi |
| L-phenylalanine(CSJ) | C9H11NO2 | 6140 | chuanshanjia |
| selina-4(14),7(11)-dien-8-one (CZ1) | C15H22O | 13986099 | cangzhu |
| atractylenolideII (CZ2) | C15H20O2 | 14448070 | cangzhu |
| butenolide B(CZ3) | C14H18O3 | MOL000187 | cangzhu |
| Stigmasterol 3-O-beta-D-glucopyranoside(CZ4) | C35H58O6 | MOL000185 | cangzhu |
| atractylenolide iii(CZ5) | C15H20O3 | 14420566 | cangzhu |
| Aractylenolide II(CZ6) | C15H20O2 | MOL000180 | cangzhu |
| atractylenolide I (CZ7) | C15H18O2 | 5321018 | cangzhu |
| 2-[(2S,5S,6S)-6,10-dimethylspiro[4.5]dec-9-en-2-yl]propan-2-ol(CZ8) | C15H26O | 10353528 | cangzhu |
| 3β-acetoxyatractylone(CZ9) | C17H22O3 | MOL000188 | cangzhu |
| 2-Hydroxyisoxypropyl-3-hydroxy-7-isopentene-2,3-dihydrobenzofuran-5-carboxylic(CZ10) | C17H22O5 | 70697841 | cangzhu |
| Wogonin(CZ11) | C16H12O5 | 5281703 | cangzhu |
| Atractylodin | C13H10O | 5321047 | cangzhu |
| atractylone | C15H20O | 12138536 | cangzhu |
| Furol | C5H4O2 | 7362 | cangzhu |
| (2E,8E)-9-(2-furyl)nona-2,8-dien-4,6-diyn-1-ol | C13H10O2 | 10012964 | cangzhu |
| acetyl atractylodinol | C15H12O3 | MOL000189 | cangzhu |
| Hypnon (DG1) | C8H8O | 7410 | danggui |
| (+)-Ledol (DG2) | C15H26O | 92812 | danggui |
| m-Ethylphenol（DG3） | C8H10O | 12101 | danggui |
| (3E)-3-butylidene-7-hydroxy-2-benzofuran-1-one（DG4） | C12H12O3 | 5852943 | danggui |
| ()-Camphoric acid（DG5） | C10H16O4 | 101807 | danggui |
| (3S)-3-butyl-3H-isobenzofuran-1-one（DG6） | C12H14O2 | 11116832 | danggui |
| (Z)-2-[[(Z)-2-methylbut-2-enoyl]oxymethyl]but-2-enoic acid（DG7） | C10H14O4 | 6440421 | danggui |
| Amyl ketone（DG8） | C11H22O | 13561 | danggui |
| 7,10-PENTADECADIYNOIC ACID（DG9） | C15H22O2 | 30942 | danggui |
| Undecanol-6（DG10） | C11H24O | 32045 | danggui |
| 5-Indolol（DG11） | C8H7NO | 16054 | danggui |
| 6-Ethylresorcinol（DG12） | C8H10O2 | 17927 | danggui |
| 1,1,5-trimethyl-2-formylcyclohexa-2,5-diene-4-one（DG13） | C10H12O2 | MOL008272 | danggui |
| 2-methyldodecan-5-one（DG14） | C13H26O | 5319599 | danggui |
| cis-Isoeugenol（DG15） | C10H12O2 | 1549041 | danggui |
| 2-Methylhexadecanoic acid（DG16） | C17H34O2 | MOL008267 | danggui |
| (Z)-2-Hexenyl hexanoate（DG17） | C12H22O2 | 5352973 | danggui |
| 2-valerylbenzoic acid（DG18） | C12H14O3 | 5315165 | danggui |
| phosphatdic acid（DG19） | C5H9O8P | 25163993 | danggui |
| o-Xylenol（DG20） | C8H10O | 10687 | danggui |
| 2,6-di(phenyl)thiopyran-4-thione（DG21） | C17H12S2 | 11832833 | danggui |
| Isotetandrine（DG22） | C38H42N2O6 | MOL008254 | danggui |
| Senkyunolide（DG23） | C12H16O2 | 54753664 | danggui |
| Sedanolide（DG24） | C12H18O2 | 12315451 | danggui |
| ESEN（DG25） | C8H4O3 | 6811 | danggui |
| phosphatidylinositol\_qt（DG26） | C5H9O8P | MOL008249 | danggui |
| WLN: QR CQ DV1（DG27） | C8H8O3 | 6990 | danggui |
| Vanillin（DG28） | C8H8O3 | 1183 | danggui |
| ETHYLBENZALDEHYDE（DG29） | C9H10O | 20861 | danggui |
| ANN（DG30） | C8H8O3 | 7478 | danggui |
| Eucarvone（DG31） | C10H14O | 136330 | danggui |
| 6,7,3',8'-diligustilide（DG32） | C24H28O4 | MOL004613 | danggui |
| o-cresol（DG33） | C7H8O | 335 | danggui |
| Maruzen M（DG34） | C8H10O | 31242 | danggui |
| nicotinic acid（DG35） | C6H5NO2 | 938 | danggui |
| FERULIC ACID (CIS) （DG36） | C10H10O4 | 1548883 | danggui |
| cis-ligustilide（DG37） | C12H14O2 | 5877292 | danggui |
| 4-Octanone（DG38） | C8H16O | 11516 | danggui |
| senkyunolide-E（DG39） | C12H12O3 | MOL002145 | danggui |
| senkyunolide-D（DG40） | C12H14O4 | MOL002144 | danggui |
| senkyunolide-C（DG41） | C12H12O3 | MOL002143 | danggui |
| BdPh（DG42） | C12H12O2 | 5352899 | danggui |
| Levistolid A (DG43) | C24H28O4 | MOL002102 | danggui |
| 3-Butylidene-7-hydroxyphthalide (DG44) | C12H12O3 | 5281559 | danggui |
| Isoeugenol (DG45) | C10H12O2 | 853433 | danggui |
| Safrol (DG46) | C10H10O2 | 5144 | danggui |
| Usaf hc-1 (DG47) | C10H18O4 | 5192 | danggui |
| 80-57-9 (DG48) | C10H14O | 65724 | danggui |
| Loxanol V (DG49) | C14H30O | 8209 | danggui |
| Decanal (DG50) | C10H20O | 8175 | danggui |
| adenine | C5H5N5 | 190 | danggui |
| Methylbutenol | C5H10O | 8257 | danggui |
| Guasol | C7H8O2 | 460 | danggui |
| Butal | C4H8O | 261 | danggui |
| 3,4-DIMETHYLBENZALDEHYDE | C9H10O | 22278 | danggui |
| TMHYDROP | C9H12O2 | 12785 | danggui |
| Mesitaldehyde | C10H12O | 10254 | danggui |
| Tropone | C7H6O | 10881 | danggui |
| BUA | C4H8O2 | 264 | danggui |
| 2,4-Xylylaldehyde | C9H10O | 61814 | danggui |
| (S)-(+)-2-Nonanol（DH1） | C9H20O | 11094753 | duhuo |
| Osthol（DH2） | C15H16O3 | 10228 | duhuo |
| Isobornyl isovalerate（DH3） | C15H26O2 | MOL004789 | duhuo |
| Angelicone（DH4） | C16H16O5 | 616303 | duhuo |
| Isobergapten（DH5） | C12H8O4 | 68082 | duhuo |
| Diphencyprone（DH6） | C15H10O | 65057 | duhuo |
| o-Cresol, 6-ethyl-（DH7） | C9H12O | 519333 | duhuo |
| Ethyllaurate（DH8） | C14H28O2 | 7800 | duhuo |
| Durenol（DH9） | C10H14O | 10694 | duhuo |
| 3,5-Dimethoxytoluene（DH10） | C9H12O2 | 77844 | duhuo |
| O-Acetylcolumbianetin（DH11） | C16H16O5 | 161409 | duhuo |
| Angelicin（DH12） | C11H6O3 | 10658 | duhuo |
| Isopimpinellin（DH13） | C13H10O5 | 68079 | duhuo |
| Zosimin（DH14） | C19H20O5 | 6436246 | duhuo |
| Methyleugenol（DH15） | C11H14O2 | 7127 | duhuo |
| Uvadex（DH16） | C12H8O4 | 4114 | duhuo |
| Psoralen（DH17） | C11H6O3 | 6199 | duhuo |
| EUG（DH18） | C9H10O2 | 332 | duhuo |
| cedryl acetate（DH19） | C17H28O2 | MOL001575 | duhuo |
| 49070\_FLUKA（DH20） | C15H26O | 12304985 | duhuo |
| Octanol（DH21） | C8H18O | 957 | duhuo |
| ZINC02040970（DH22） | C15H26O | 11241545 | duhuo |
| CRS（DH23） | C7H8O | 342 | duhuo |
| Syringaldehyde | C9H10O4 | 8655 | duhuo |
| Angelic acid | C5H8O2 | 643915 | duhuo |
| phenethyl,vanillate（QH1） | C17H18O5 | MOL011979 | qianghuo |
| Notopterol（QH2） | C22H25O4 | MOL011974 | qianghuo |
| anisocoumarin,h(QH3) | C19H23O4 | MOL011965 | qianghuo |
| 8-geranoxy-5-methoxypsoralen（QH4） | C22H25O5 | MOL011963 | qianghuo |
| 4,8,12-trimethyltridecanoic acid methyl ester（QH5） | C17H34O2 | MOL011961 | qianghuo |
| 14-methylhexadecaoic acid methyl ester（QH6） | C18H34O2 | MOL011960 | qianghuo |
| Nodakenetin（QH7） | C14H15O3 | MOL011748 | qianghuo |
| WLN: QR BVO1R（QH8） | C14H12O3 | 8363 | qianghuo |
| 2-Decenal（QH9） | C10H18O | 5354834 | qianghuo |
| nonanoic acid（QH10） | C9H18O2 | 8158 | qianghuo |
| WLN: QV4（QH11） | C5H10O2 | 7991 | qianghuo |
| Diosmetin（QH12） | C16H12O6 | 5281612 | qianghuo |
| Phellopterin（QH13） | C17H16O5 | 98608 | qianghuo |
| 1H-Cycloprop(e)azulen-7-ol, decahydro-1,1,7-trimethyl-4-methylene-, (1aR-(1aalpha,4aalpha,7beta,7abeta,7balpha))-（QH14） | C15H24O | 92231 | qianghuo |
| PLO（QH15） | C21H32O2 | 8955 | qianghuo |
| (1S,4R,5R)-1-isopropyl-4-methyl-4-bicyclo[3.1.0]hexanol（QH16） | C10H18O | 6326181 | qianghuo |
| hexanoic acid（QH17） | C6H12O2 | 8892 | qianghuo |
| PENTADECYLIC ACID（QH18） | C15H30O2 | 13849 | qianghuo |
| myristic acid（QH19） | C14H28O2 | 11005 | qianghuo |
| epi-10- .gamma.-Eudesmol（QH20） | C15H26O | 6430754 | qianghuo |
| trans-2,4-decadienal（QH21） | C10H16O | 5283349 | qianghuo |
| β-terpineol（QH22） | C10H18O | 8748 | qianghuo |
| isoimperatorin | C17H17O4 | MOL011972 | qianghuo |
| lauric acid（QH24） | C12H24O2 | 3893 | qianghuo |
| caprylic acid（QH25） | C8H16O2 | 379 | qianghuo |
| Undekansaeure（QH26） | C11H22O2 | 8180 | qianghuo |
| ()-Borneol（QH27） | C10H18O | 6552009 | qianghuo |
| dec-2-enal (QH28) | C10H18O | 5283345 | qianghuo |
| p-coumaric acid（QH29） | C9H8O3 | 637542 | qianghuo |
| OYA（QH30） | C8H16O | 454 | qianghuo |
| APIOL（QH31） | C12H14O4 | 10659 | qianghuo |
| ()-Terpinen-4-ol（QH32） | C10H18O | 2724161 | qianghuo |
| cis-p-Coumarate（QH33） | C9H8O3 | 1549106 | qianghuo |
| Thymol（QH34） | C10H14O | 6989 | qianghuo |
| L-Bornyl acetate（QH35） | C12H20O2 | 93009 | qianghuo |
| Cnidilin（QH36） | C17H16O5 | 821449 | qianghuo |
| Xanthotoxol（QH37） | C11H6O4 | 65090 | qianghuo |
| Bergaptin（QH38） | C21H22O4 | 5471349 | qianghuo |
| Falcarindiol（QH39） | C17H24O2 | 5281148 | qianghuo |
| Methyl myristate（QH40） | C15H30O2 | 31284 | qianghuo |
| Acetate C-8（QH41） | C10H20O2 | 8164 | qianghuo |
| cis-Verbenyl acetate（QH42） | C12H18O2 | 6427494 | qianghuo |
| Pterostilbene（QH43） | C16H16O3 | 5281727 | qianghuo |
| Phenyethyl 3-methylcaffeate（QH44） | C18H18O4 | 5284444 | qianghuo |
| p-Hydroxyphenethyl trans-ferulate（QH45） | C18H18O5 | 637308 | qianghuo |
| 2-(4-hydroxyphenyl)ethyl 4-methoxybenzoate（QH46） | C16H16O4 | 14704104 | qianghuo |
| Demethylfuropinnarin（QH47） | C16H14O4 | 5316520 | qianghuo |
| Bergaptol（QH48） | C11H6O4 | 5280371 | qianghuo |
| O-Methylthymol | C11H16O | 14104 | qianghuo |
| Cumalic acid | C6H4O4 | 68141 | qianghuo |
| Prenal | C5H8O | 61020 | qianghuo |
| Tyranton | C6H12O2 | 31256 | qianghuo |
| Anizol | C7H8O | 7519 | qianghuo |
| Prenol | C5H10O | 11173 | qianghuo |
| Darutoside（SY1） | C35H58O6 | MOL000628 | shanyao |
| DTY（SY2） | C9H11NO3 | 6942100 | shanyao |
| 1,3,6-trihydroxy-8-(3-hydroxy-3-methyl-butyl)-7-methoxy-2-(3-methylbut-2-enyl)xanthone（SY3） | C24H28O7 | 5495926 | shanyao |
| (3S,4aS,4bS,8R,8aS,10aR)-3-hydroxy-1,1,4a,8-tetramethyl-7-vinyl-3,4,4b,8,8a,9,10,10a-octahydrophenanthrene-2,5-dione（SY4） | C20H28O3 | 10313699 | shanyao |
| ophipogonin D\_qt（SY5） | C27H42O3 | MOL005460 | shanyao |
| Diosgenin（SY6） | C27H42O3 | 99474 | shanyao |
| Diosgenin-3-O-beta-D-glucopyranoside（SY7） | C33H52O8 | MOL005459 | shanyao |
| Dioscoreside C\_qt（SY8） | C28H44O4 | MOL005458 | shanyao |
| Deltoside\_qt（SY9） | C27H42O4 | MOL005457 | shanyao |
| (-)-ABA（SY10） | C15H20O4 | 643732 | shanyao |
| Leucinum（SY11） | C6H13NO2 | 7045798 | shanyao |
| Batatasin IV（SY12） | C15H16O3 | 181271 | shanyao |
| 3-[2-(3-hydroxyphenyl)ethyl]-5-methoxyphenol（SY13） | C15H16O3 | 10466989 | shanyao |
| Batatasin I（SY14） | C17H16O4 | 442694 | shanyao |
| LDP（SY15） | C8H11NO2 | 681 | shanyao |
| (2S,3S,3aR)-3a-allyl-2-(1,3-benzodioxol-5-yl)-5-methoxy-3-methyl-2,3-dihydrobenzofuran-6-one（SY16） | C20H20O5 | 10903924 | shanyao |
| 24-Methylcholest-5-enyl-3belta-O-glucopyranoside（SY17） | C34H58O6 | MOL005434 | shanyao |
| ABK（SY18） | C15H20O4 | 5280896 | shanyao |
| Crotepoxide（SY19） | C18H18O8 | 161314 | shanyao |
| Hancinol（SY20） | C22H28O5 | MOL005429 | shanyao |
| PHA（SY21） | C9H11NO2 | 6925665 | shanyao |
| Kadsurenone（SY22） | C21H24O5 | 122159 | shanyao |
| Denudatin B（SY23） | C21H24O5 | 442834 | shanyao |
| denudatin,a（SY24） | C20H20O5 | 13336517 | shanyao |
| Pellitorin（SY25） | C14H25NO | 5318516 | shanyao |
| Piperlonguminine（SY26） | C17H19NO5 | 637858 | shanyao |
| hancinone D（SY27） | C21H22O5 | 5281817 | shanyao |
| (25R)-spirost-5-en-3β-ol（SY28） | C27H42O3 | 90658110 | shanyao |
| Futoamide（SY29） | C18H23NO3 | 15596445 | shanyao |
| Burchellin（SY30） | C20H20O5 | 100199 | shanyao |
| abscisinII（SY31） | C15H20O4 | 5375200 | shanyao |
| Hancinone（SY32） | C20H20O5 | 101370414 | shanyao |
| batatasinⅤ（SY33） | C17H20O4 | 12888722 | shanyao |
| γ-aminobutyric acid | C4H9NO2 | 119 | shanyao |
| L-Ile | C6H13NO2 | 7043901 | shanyao |
| histidine | C6H9N3O2 | 6274 | shanyao |
| hancinone C | C23H28O6 | 6443896 | shanyao |
| phytic acid | C6H18O24P6 | 890 | shanyao |
| AIDS180907 | C23H22O6 | 5495928 | shanyao |
| L-Valin | C5H11NO2 | 6971018 | shanyao |
| dehydroglyasperins C（GC1） | C20H20O5 | MOL005020 | gancao |
| Glabridin（GC2） | C20H20O4 | 124052 | gancao |
| 18α-hydroxyglycyrrhetic acid (GC3) | C30H46O5 | MOL005013 | gancao |
| Kanzonol Z（GC4） | C25H26O5 | MOL005011 | gancao |
| Glycyrrhiza flavonol A（GC5） | C20H18O7 | MOL005008 | gancao |
| Glyasperins M（GC6） | C21H20O6 | MOL005007 | gancao |
| Glyasperins K（GC7） | C22H24O5 | MOL005006 | gancao |
| 8-prenylated eriodictyol（GC8） | C20H20O6 | MOL004993 | gancao |
| 6-prenylated eriodictyol (GC9) | C20H20O6 | MOL004989 | gancao |
| Kanzonol F (GC10) | C26H28O5 | MOL004988 | gancao |
| 6″-O-acetylliquiritin (GC11) | C23H24O9 | MOL004986 | gancao |
| 3β-formylglabrolide（GC12） | C31H44O5 | MOL004975 | gancao |
| 3,4,3',4'-Tetrahydroxy-2-methoxychalcone（GC13） | C16H16O5 | MOL004968 | gancao |
| 3'(γ,γ-dimethylallyl)-kievitone（GC14） | C25H28O6 | MOL004965 | gancao |
| 24-Hydroxyglycyrrhetic acid（GC15） | C30H46O5 | MOL004963 | gancao |
| 24-Hydroxy-11-deoxyglycyrrhetic acid（GC16） | C29H46O4 | MOL004962 | gancao |
| Isoglabrolide（GC17） | C30H44O4 | MOL004955 | gancao |
| Isograbrol（GC18） | C25H28O4 | MOL004954 | gancao |
| Isoglycyrol（GC19） | C21H18O6 | MOL004948 | gancao |
| Glabrolide（GC20） | C30H44O4 | MOL004909 | gancao |
| 3,22-Dihydroxy-11-oxo-delta(12)-oleanene-27-alpha-methoxycarbonyl-29-oic acid（GC21） | C31H44O6 | MOL004905 | gancao |
| Licopyranocoumarin（GC22） | C21H20O7 | MOL004904 | gancao |
| Glycyrrhetol（GC23） | C30H48O3 | MOL004902 | gancao |
| licorice-saponin K2\_qt（GC24） | C30H46O4 | MOL004901 | gancao |
| licorice-saponin J2\_qt（GC25） | C30H48O4 | MOL004897 | gancao |
| licorice-saponin H2\_qt（GC26） | C30H46O4 | MOL004895 | gancao |
| licorice-saponin G2\_qt（GC27） | C30H46O5 | MOL004893 | gancao |
| Shinpterocarpin（GC28） | C20H18O4 | MOL004891 | gancao |
| licorice-saponin F3\_qt（GC29） | C30H46O3 | MOL004889 | gancao |
| Licoisoflavanone（GC30） | C20H18O6 | MOL004885 | gancao |
| liquoric acid（GC31） | C30H44O5 | MOL004850 | gancao |
| apioglycyrrhizin\_qt（GC32） | C30H46O4 | MOL004846 | gancao |
| glabrol（GC33） | C25H28O4 | MOL004844 | gancao |
| licochalconeD（GC34） | C21H22O5 | MOL004843 | gancao |
| licochalcone C（GC35） | C21H22O4 | MOL004842 | gancao |
| Echinatin（GC36） | C16H14O4 | MOL004836 | gancao |
| Licoagropin（GC37） | C22H24O2 | MOL004823 | gancao |
| kanzonols K（GC38） | C26H28O6 | MOL004817 | gancao |
| glyasperins Z（GC39） | C21H24O4 | MOL004813 | gancao |
| glyasperins D（GC40） | C22H26O5 | MOL004812 | gancao |
| Inermine（GC41） | C16H12O5 | MOL001484 | gancao |
| glyasperin F（GC42） | C20H18O6 | MOL004810 | gancao |
| glyasperin E（GC43） | C27H24O6 | MOL004809 | gancao |
| glyasperin B（GC44） | C21H22O6 | MOL004808 | gancao |
| Euchrenone（GC45） | C26H30O4 | MOL004806 | gancao |
| 2',7-Dihydroxy-4'-methoxyisoflavan-7-O-β-d-glucopyranoside（GC46） | C22H26O9 | MOL004801 | gancao |
| Calycosin（GC47） | C16H12O5 | 5280448 | gancao |
| Quercetin（GC48） | C15H10O7 | 5280343 | gancao |
| 2-heptanone（GC49） | C7H14O | 8051 | gancao |
| DBP（GC50） | C16H22O4 | 3026 | gancao |
| ()-Menthol（GC51） | C10H20O | 165675 | gancao |
| DIBP（GC52） | C16H22O4 | 6782 | gancao |
| Mipax（GC53） | C10H10O4 | 8554 | gancao |
| (2R)-7-hydroxy-2-[4-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]chroman-4-one（GC54） | C20H20O4 | 7330518 | gancao |
| Phaseol（GC55） | C20H16O5 | 44257530 | gancao |
| Odoratin（GC56） | C17H14O6 | 13965473 | gancao |
| Licoagroisoflavone（GC57） | C20H16O5 | 636883 | gancao |
| Corylifolinin（GC58） | C20H20O4 | 5281255 | gancao |
| Gancaonin I（GC59） | C21H22O5 | 480777 | gancao |
| Licoagrocarpin（GC60） | C21H22O4 | 15840593 | gancao |
| beta-glycyrrhetinic acid（GC61） | C30H46O4 | 73398 | gancao |
| Gancaonin H（GC62） | C25H24O6 | 5481949 | gancao |
| Gancaonin G（GC63） | C21H20O5 | 480780 | gancao |
| Vestitol（GC64） | C16H16O4 | 177149 | gancao |
| Kanzonol H（GC65） | C26H32O5 | 480863 | gancao |
| 7-hydroxy-2-methyl-3-phenyl-chromone（GC66） | C16H12O3 | 5380976 | gancao |
| 7-Acetoxy-2-methylisoflavone（GC67） | C18H14O4 | 268208 | gancao |
| 7,2',4'-trihydroxy－5-methoxy-3－arylcoumarin（GC68） | C16H12O6 | 25015742 | gancao |
| Licoriisoflavan A (GC69) | C27H34O5 | 196831 | gancao |
| 5,6,7,8-Tetrahydro-4-methylquinoline (GC70) | C10H13N | 185667 | gancao |
| 1-(5-hydroxy-2,2-dimethylchromen-6-yl)-3-(4-hydroxyphenyl)prop-2-en-1-one (GC71) | C20H18O4 | 5889042 | gancao |
| Inflacoumarin A（GC72） | C20H18O4 | 5318437 | gancao |
| 2-[(3R)-8,8-dimethyl-3,4-dihydro-2H-pyrano[6,5-f]chromen-3-yl]-5-methoxyphenol（GC73） | C21H22O4 | 9927807 | gancao |
| Daidzein dimethyl ether（GC74） | C17H14O4 | 136419 | gancao |
| 3'-Methoxyglabridin（GC75） | C21H22O5 | 15228663 | gancao |
| licochalcone a（GC76） | C21H22O4 | 5318998 | gancao |
| 3'-Hydroxy-4'-O-Methylglabridin（GC77） | C21H22O5 | 15228662 | gancao |
| (Z)-1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-phenylprop-2-en-1-one（GC78） | C15H12O3 | 10331849 | gancao |
| Quercetin der.（GC79） | C17H14O7 | 5316900 | gancao |
| 1-Methoxyphaseollidin（GC80） | C21H22O5 | 480873 | gancao |
| HMO（GC81） | C16H12O4 | 3764 | gancao |
| Isoononin（GC82） | C22H22O9 | 5318619 | gancao |
| Isoglycycoumarin（GC83） | C21H20O6 | 14187587 | gancao |
| Isolicoflavonol（GC84） | C20H18O6 | 5318585 | gancao |
| 2-Tetradecanone（GC85） | C14H28O | 75364 | gancao |
| (2S)-7-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)-8-(3-methylbut-2-enyl)chroman-4-one（GC86） | C20H20O4 | 193679 | gancao |
| (2R)-7-hydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)chroman-4-one（GC87） | C15H12O4 | 928837 | gancao |
| Nortangeretin（GC88） | C15H10O7 | 96506 | gancao |
| Uralene（GC89） | C21H20O7 | 192490 | gancao |
| Sigmoidin-B（GC90） | C20H20O6 | 73205 | gancao |
| Uralenol-3-methylether（GC91） | C21H20O7 | 5315127 | gancao |
| Uralenol（GC92） | C20H18O7 | 5315126 | gancao |
| Pentadecanol （GC93） | C15H32O | 12397 | gancao |
| Hispaglabridin A（GC94） | C25H28O4 | 442774 | gancao |
| (-)-Medicocarpin（GC95） | C22H24O9 | 23724664 | gancao |
| Ononin（GC96） | C22H22O9 | 442813 | gancao |
| Eurycarpin A（GC97） | C20H18O5 | 5317300 | gancao |
| 1,3-dihydroxy-8,9-dimethoxy-6-benzofurano[3,2-c]chromenone（GC98） | C17H12O7 | 11602329 | gancao |
| 1,3-dihydroxy-9-methoxy-6-benzofurano[3,2-c]chromenone（GC99） | C16H10O6 | 11558452 | gancao |
| Glabrone（GC100） | C20H16O5 | 5317652 | gancao |
| Glabrene（GC101） | C20H18O4 | 480774 | gancao |
| Glabranin（GC102） | C20H20O4 | 124049 | gancao |
| Hispaglabridin B（GC103） | C25H26O4 | 15228661 | gancao |
| Glyzaglabrin（GC104） | C16H10O6 | 5317777 | gancao |
| (E)-3-[3,4-dihydroxy-5-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-1-(2,4-dihydroxyphenyl)prop-2-en-1-one（GC105） | C20H20O5 | 11267805 | gancao |
| Licoisoflavone B (GC106) | C20H16O6 | 5481234 | gancao |
| Licoisoflavone (GC107) | C20H18O6 | 5281789 | gancao |
| Licocoumarone (GC108) | C20H20O5 | 503731 | gancao |
| (E)-1-[2,4-dihydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-3-(2,4-dihydroxyphenyl)prop-2-en-1-one(GC109) | C20H20O5 | 9862769 | gancao |
| 5,6,7,8-Tetrahydro-2,4-dimethylquinoline(GC110) | C11H15N | 5321849 | gancao |
| Glycyrin(GC111) | C22H22O6 | 480787 | gancao |
| Glycycoumarin (GC112) | C21H20O6 | 5317756 | gancao |
| Licoricidin (GC113) | C26H32O5 | 480865 | gancao |
| 3-[4,6-dihydroxy-2-methoxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-7-hydroxy-chromone (GC114) | C21H20O6 | 10361658 | gancao |
| Gancaonin V(GC115) | C19H20O4 | 480817 | gancao |
| Gancaonin U(GC116) | C24H28O4 | 480818 | gancao |
| Gancaonin S (GC117) | C24H30O4 | 480816 | gancao |
| Gancaonin R (GC118) | C24H30O4 | 480815 | gancao |
| Gancaonin Q (GC119) | C25H26O5 | 480802 | gancao |
| Gancaonin P (GC120) | C20H18O7 | 5481966 | gancao |
| 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-6-(3-methylbut-2-enyl)chromone (GC121) | C20H18O6 | 14604081 | gancao |
| 5,7-dihydroxy-3-(2-hydroxy-4-methoxy-phenyl)-6-(3-methylbut-2-enyl)chromone (GC122) | C21H20O6 | 14604080 | gancao |
| 5,7-dihydroxy-3-(4-methoxyphenyl)-8-(3-methylbut-2-enyl)chromone (GC123) | C21H20O5 | 14604078 | gancao |
| 3-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-8-(3-methylbut-2-enyl)chromone (GC124) | C20H18O6 | 14604077 | gancao |
| (2R)-2-[3,4-dihydroxy-5-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-5,7-dihydroxy-8-(3-methylbut-2-enyl)chroman-4-one (GC125) | C25H28O6 | 14539875 | gancao |
| Gancaonin D (GC126) | C21H20O7 | 5317481 | gancao |
| Prunetin (GC127) | C16H12O5 | 5281804 | gancao |
| Gancaonin C (GC128) | C20H18O6 | 6450959 | gancao |
| Gancaonin B (GC129) | C21H20O6 | 5317479 | gancao |
| Gancaonin A (GC130) | C21H20O5 | 5317478 | gancao |
| Licoricone (GC131) | C22H22O6 | 5319013 | gancao |
| Yinyanghuo D（GC132） | C20H18O5 | 5315396 | gancao |
| Licoflavonol（GC133） | C20H18O6 | 5481964 | gancao |
| 7-hydroxy-2-[4-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-6-(3-methylbut-2-enyl)chromone（GC134） | C25H26O4 | 11349817 | gancao |
| Licoflavone（GC135） | C20H18O4 | 5319000 | gancao |
| 3-(2,4-dihydroxyphenyl)-8-(1,1-dimethylprop-2-enyl)-7-hydroxy-5-methoxy-coumarin（GC136） | C21H20O6 | 10090416 | gancao |
| licochalcone G（GC137） | C21H22O5 | 49856081 | gancao |
| Licochalcone B（GC138） | C16H14O5 | 5318999 | gancao |
| Liconeolignan（GC139） | C21H22O5 | 133867 | gancao |
| 8-(6-hydroxy-2-benzofuranyl)-2,2-dimethyl-5-chromenol（GC140） | C19H16O4 | 10542808 | gancao |
| Karenzu DK2（GC141） | C15H12O2 | 8433 | gancao |
| Glypallichalcone（GC142） | C17H16O4 | 5317768 | gancao |
| 3-(2-hydroxy-4-methoxyphenyl)-2H-chromen-7-ol（GC143） | C16H14O4 | 10378419 | gancao |
| Phaseolinisoflavan（GC144） | C20H20O4 | 162412 | gancao |
| WLN: 4OVR（GC145） | C11H14O2 | 8698 | gancao |
| (E)-1-[2,4-dihydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-3-[4-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]prop-2-en-1-one（GC146） | C25H28O4 | 5316802 | gancao |
| Glepidotin A（GC147） | C20H18O5 | 5281619 | gancao |
| Semilicoisoflavone B（GC148） | C20H16O6 | 5481948 | gancao |
| glyinflanin A（GC149） | C25H28O5 | 42607642 | gancao |
| (2S)-6-(2,4-dihydroxyphenyl)-2-(2-hydroxypropan-2-yl)-4-methoxy-2,3-dihydrofuro[3,2-g]chromen-7-one（GC150） | C21H20O7 | 637112 | gancao |
| (E)-1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-[4-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]prop-2-en-1-one（GC151） | C20H20O4 | 11099375 | gancao |
| kanzonols W（GC152） | C20H16O5 | 15380912 | gancao |
| (2R)-1-[2,4-dihydroxy-5-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-2-hydroxy-3-[4-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]propan-1-one（GC153） | C25H30O5 | 10001604 | gancao |
| (E)-1-(2,4-dihydroxyphenyl)-3-(2,2-dimethylchromen-6-yl)prop-2-en-1-one (GC154) | C20H18O4 | 10881804 | gancao |
| Isotrifoliol（GC155） | C16H10O6 | 5318679 | gancao |
| Glyasperin C（GC156） | C21H24O5 | 480859 | gancao |
| 18beta-glycyrrhetinic acid（GC157） | C30H46O4 | 10114 | gancao |
| 3-Hydroxyglabrol (GC158) | C25H28O5 | 480854 | gancao |
| (E)-1-butoxyhex-2-ene（GC159） | C10H20O | 5364961 | gancao |
| Anethole（GC160） | C10H12O | 637563 | gancao |
| Castanin（GC161） | C17H14O5 | 5281704 | gancao |
| 8-Prenylwighteone（GC162） | C25H26O5 | 480783 | gancao |
| Naringenin（GC163） | C15H12O5 | 439246 | gancao |
| Kaempferol（GC164） | C15H10O6 | 5280863 | gancao |
| 2-Caren-10-al（GC165） | C10H14O | 12678291 | gancao |
| Formononetin（GC166） | C16H12O4 | 5280378 | gancao |
| 7-Methoxy-2-methyl isoflavone（GC167） | C17H14O3 | 354368 | gancao |
| 7,4'-Dihydroxyflavone（GC168） | C15H10O4 | 5282073 | gancao |
| Lupiwighteone（GC169） | C20H18O5 | 5317480 | gancao |
| Isorhamnetin（GC170） | C16H12O7 | 5281654 | gancao |
| Neouralenol（GC171） | C20H18O7 | 5320118 | gancao |
| butylated hydroxytoluene（GC172） | C15H24O | 31404 | gancao |
| Pinocembrin（GC173） | C15H12O4 | 68071 | gancao |
| Medicarpin（GC174） | C16H14O4 | 336327 | gancao |
| Jaranol（GC175） | C17H14O6 | 5318869 | gancao |
| Glycyrol（GC176） | C21H18O6 | 5320083 | gancao |
| Izoforon（GC177） | C9H14O | 6544 | gancao |
| DFV（GC178） | C15H12O4 | 114829 | gancao |
| Isoliquiritigenin（GC179） | C15H12O4 | 638278 | gancao |
| ICO（GC180） | C9H7NO2 | 69867 | gancao |
| Morusin（GC181） | C25H24O6 | 5281671 | gancao |
| (L)-alpha-Terpineol（GC182） | C10H18O | 443162 | gancao |
| Araboglycyrrhizin\_qt(183) | C30H46O4 | MOL004998 | gancao |
| 1-Methoxyficifolinol | C26H30O5 | 480872 | gancao |
| (2S)-2-[4-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)phenyl]-8,8-dimethyl-2,3-dihydropyrano[2,3-f]chromen-4-one | C25H26O4 | 197678 | gancao |
| BuOH | C4H10O | 263 | gancao |
| kanzonols X | C25H30O4 | MOL004821 | gancao |
| gancaonin T | C24H30O5 | MOL004872 | gancao |
| Xambioona | C25H24O4 | MOL005018 | gancao |
| Cyclobutanol, 1-ethyl- | C6H12O | 145025 | gancao |
| 2,6,10-trimethyl-dodecane | C6H8O4 | MOL004982 | gancao |
| Kanzonol E | C25H24O4 | 15516846 | gancao |
| Syringaresinol(a) | C22H26O8 | 443023 | rougui，wujiapi |
| protocatechuic acid(b) | C7H6O4 | 72 | rougui，gancao |
| h-Met-h（c） | C5H11NO2S | 6992087 | danggui，shanyao |
| vanillic acid(d1) | C8H8O4 | 8468 | cangzhu，qianghuo |
| 2-[(1R,3S,4S)-3-isopropenyl-4-methyl-4-vinylcyclohexyl]propan-2-ol (d2) | C15H26O | 92138 | cangzhu，qianghuo |
| beta-Eudesmol(d3) | C15H26O | 91457 | cangzhu，qianghuo |
| DL-METHIONINE(e1) | C5H11NO2S | 876 | chuanshanjia，shanyao |
| Leucine(e2) | C6H13NO2 | 6106 | chuanshanjia，shanyao |
| Lysine(e3) | C6H14N2O2 | 5962 | chuanshanjia，shanyao |
| Proline(e4) | C5H9NO2 | 145742 | chuanshanjia，shanyao |
| Tyrosine(e5) | C9H11NO3 | 6057 | chuanshanjia，shanyao |
| DL-Glutamic acid | C5H9NO4 | 611 | chuanshanjia，shanyao |
| DL-ISOLEUCINE | C6H13NO2 | 791 | chuanshanjia，shanyao |
| Cuminal（f1） | C10H12O | 326 | danggui，duhuo |
| Ethol（f2） | C16H34O | 2682 | danggui，duhuo |
| Nonanal(f3) | C9H18O | 31289 | danggui，duhuo |
| o-Acetyl-p-cresol (f4) | C9H10O2 | 15068 | danggui，duhuo |
| PCR（f5） | C7H8O | 2879 | danggui，duhuo |
| Coniferyl ferulate（g1） | C20H20O6 | 6441913 | danggui，qianghuo |
| NON (g2) | C10H20O2 | 2969 | danggui，qianghuo |
| Benzaldehyde(h1) | C7H6O | 240 | rougui，qianghuo |
| benzyl benzoate(h2) | C14H12O2 | 2345 | rougui，qianghuo |
| Coumarin(h3) | C9H6O2 | 323 | rougui，qianghuo |
| Guaiol(i1) | C15H26O | 227829 | cangzhu，duhuo，qianghuo |
| ZINC01609418(i2) | [C15H26O](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/" \l "query=C15H26O" \o "Find all compounds that have this formula) | 1549992 | cangzhu，duhuo，qianghuo |
| ()-alpha-Terpineol（j1） | C10H18O | 442501 | danggui，duhuo，qianghuo |
| FER（j2） | C10H10O4 | 445858 | danggui，duhuo，qianghuo |
| o-Thymol（j3） | C10H14O | 10364 | danggui，duhuo，qianghuo |
| palmitic acid（j4） | C16H32O2 | 985 | danggui，duhuo，qianghuo |
| Scopoletol（k1） | C10H8O4 | 5280460 | danggui，duhuo，qianghuo，gancao |
| WLN: VH6（k2） | C7H14O | 8130 | danggui，duhuo，qianghuo，gancao |
| 2-NONANONE（l1） | C9H18O | 13187 | duhuo，qianghuo |
| methyl palmitate（l2） | C17H34O2 | 8181 | duhuo，qianghuo |
| Skimmetin（l3） | C9H6O3 | 5281426 | duhuo，qianghuo |
| Majudin（l4） | C12H8O4 | 2355 | duhuo，qianghuo |
| Isoimperatorin（l5） | C16H14O4 | 68081 | duhuo，qianghuo |
| Ammidin（l6） | C16H14O4 | 10212 | duhuo，qianghuo |
| Decyl acetate（l7） | C12H24O2 | 8167 | duhuo，qianghuo |
| 2-[(1R)-2,2,3-trimethyl-1-cyclopent-3-enyl]ethanal（l8） | C10H16O | 1252759 | duhuo，qianghuo |
| Hexanal | C6H12O | 6184 | duhuo，qianghuo |
| 12-methyltetradecanoate（m1） | C16H32O2 | MOL004994 | qianghuo，gancao |
| PENTYLFURAN（m2） | C9H14O | 19602 | qianghuo，gancao |