Table S1. The natural products from the three major ingredients of Shuanghuanglian

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Lonicerae Japonicae Flos* (Total: 236; Unique: 199) | | | | | |
| MOL000006 | MOL000007 | MOL000008 | MOL000009 | MOL000010 | MOL000019 |
| MOL000034 | MOL000036 | MOL000066 | MOL000069 | MOL000098 | MOL000103 |
| MOL000105 | MOL000116 | MOL000123 | MOL000125 | MOL000130 | MOL000149 |
| MOL000163 | MOL000171 | MOL000172 | MOL000196 | MOL000232 | MOL000252 |
| MOL000254 | MOL000259 | MOL000263 | MOL000266 | MOL000267 | MOL000303 |
| MOL000305 | MOL000346 | MOL000357 | MOL000358 | MOL000414 | MOL000415 |
| MOL000422 | MOL000449 | MOL000479 | MOL000511 | MOL000551 | MOL000561 |
| MOL000579 | MOL000597 | MOL000615 | MOL000650 | MOL000651 | MOL000655 |
| MOL000656 | MOL000663 | MOL000666 | MOL000671 | MOL000674 | MOL000700 |
| MOL000707 | MOL000708 | MOL000714 | MOL000734 | MOL000771 | MOL000777 |
| MOL000875 | MOL000879 | MOL000885 | MOL000886 | MOL000895 | MOL000908 |
| MOL000920 | MOL000971 | MOL001123 | MOL001168 | MOL001180 | MOL001283 |
| MOL001285 | MOL001300 | MOL001388 | MOL001392 | MOL001393 | MOL001398 |
| MOL001410 | MOL001494 | MOL001495 | MOL001600 | MOL001604 | MOL001620 |
| MOL001640 | MOL001641 | MOL001680 | MOL001681 | MOL001719 | MOL001773 |
| MOL001837 | MOL001875 | MOL001955 | MOL001980 | MOL001982 | MOL002003 |
| MOL002042 | MOL002083 | MOL002085 | MOL002121 | MOL002229 | MOL002351 |
| MOL002379 | MOL002496 | MOL002522 | MOL002566 | MOL002675 | MOL002697 |
| MOL002702 | MOL002707 | MOL002773 | MOL002854 | MOL002914 | MOL003004 |
| MOL003005 | MOL003006 | MOL003007 | MOL003008 | MOL003009 | MOL003010 |
| MOL003011 | MOL003012 | MOL003013 | MOL003014 | MOL003015 | MOL003016 |
| MOL003017 | MOL003018 | MOL003019 | MOL003020 | MOL003021 | MOL003022 |
| MOL003023 | MOL003024 | MOL003025 | MOL003026 | MOL003027 | MOL003028 |
| MOL003030 | MOL003031 | MOL003032 | MOL003033 | MOL003034 | MOL003035 |
| MOL003036 | MOL003037 | MOL003038 | MOL003040 | MOL003041 | MOL003042 |
| MOL003043 | MOL003044 | MOL003047 | MOL003048 | MOL003049 | MOL003050 |
| MOL003051 | MOL003052 | MOL003053 | MOL003054 | MOL003055 | MOL003056 |
| MOL003057 | MOL003058 | MOL003059 | MOL003060 | MOL003061 | MOL003062 |
| MOL003063 | MOL003064 | MOL003065 | MOL003066 | MOL003067 | MOL003068 |
| MOL003069 | MOL003071 | MOL003072 | MOL003073 | MOL003074 | MOL003075 |
| MOL003076 | MOL003077 | MOL003078 | MOL003079 | MOL003080 | MOL003081 |
| MOL003082 | MOL003083 | MOL003084 | MOL003085 | MOL003086 | MOL003087 |
| MOL003088 | MOL003089 | MOL003090 | MOL003091 | MOL003092 | MOL003093 |
| MOL003094 | MOL003095 | MOL003096 | MOL003097 | MOL003098 | MOL003099 |
| MOL003100 | MOL003101 | MOL003102 | MOL003103 | MOL003104 | MOL003105 |
| MOL003106 | MOL003107 | MOL003108 | MOL003109 | MOL003110 | MOL003111 |
| MOL003112 | MOL003113 | MOL003114 | MOL003116 | MOL003117 | MOL003118 |
| MOL003119 | MOL003120 | MOL003121 | MOL003122 | MOL003123 | MOL003124 |
| MOL003125 | MOL003126 | MOL003127 | MOL003128 | MOL003129 | MOL003130 |
| MOL004368 | MOL006218 |  |  |  |  |
| *Scutellariae Radix* (Total: 143; Unique: 117) | | | | | |
| MOL000007 | MOL000008 | MOL000018 | MOL000024 | MOL000035 | MOL000069 |
| MOL000073 | MOL000122 | MOL000131 | MOL000169 | MOL000173 | MOL000198 |
| MOL000219 | MOL000228 | MOL000254 | MOL000303 | MOL000357 | MOL000358 |
| MOL000359 | MOL000396 | MOL000449 | MOL000458 | MOL000525 | MOL000552 |
| MOL000610 | MOL000612 | MOL000654 | MOL000669 | MOL000676 | MOL000708 |
| MOL000709 | MOL000714 | MOL000715 | MOL000717 | MOL000771 | MOL000789 |
| MOL000860 | MOL000864 | MOL000867 | MOL000868 | MOL000869 | MOL000870 |
| MOL000879 | MOL000885 | MOL001132 | MOL001300 | MOL001386 | MOL001392 |
| MOL001393 | MOL001458 | MOL001490 | MOL001506 | MOL001578 | MOL001689 |
| MOL001817 | MOL001818 | MOL001889 | MOL001972 | MOL002027 | MOL002046 |
| MOL002137 | MOL002202 | MOL002378 | MOL002560 | MOL002573 | MOL002714 |
| MOL002737 | MOL002819 | MOL002879 | MOL002897 | MOL002908 | MOL002909 |
| MOL002910 | MOL002911 | MOL002912 | MOL002913 | MOL002914 | MOL002915 |
| MOL002916 | MOL002917 | MOL002918 | MOL002919 | MOL002921 | MOL002922 |
| MOL002923 | MOL002924 | MOL002925 | MOL002926 | MOL002927 | MOL002928 |
| MOL002929 | MOL002930 | MOL002931 | MOL002932 | MOL002933 | MOL002934 |
| MOL002935 | MOL002936 | MOL002937 | MOL003050 | MOL003055 | MOL003127 |
| MOL003393 | MOL003475 | MOL003535 | MOL003568 | MOL003920 | MOL004464 |
| MOL004682 | MOL004684 | MOL005021 | MOL005224 | MOL005272 | MOL005368 |
| MOL005402 | MOL005577 | MOL005841 | MOL006219 | MOL006312 | MOL006370 |
| MOL007197 | MOL007792 | MOL008151 | MOL008206 | MOL008595 | MOL008615 |
| MOL009520 | MOL009730 | MOL009734 | MOL010206 | MOL010415 | MOL010563 |
| MOL011081 | MOL011322 | MOL012240 | MOL012245 | MOL012246 | MOL012266 |
| MOL012267 | MOL012564 | MOL013062 | MOL013068 | MOL013161 |  |
| *Forsythiae Fructus* (Total: 150; Unique: 123) | | | | | |
| MOL000006 | MOL000019 | MOL000023 | MOL000024 | MOL000069 | MOL000098 |
| MOL000114 | MOL000117 | MOL000124 | MOL000125 | MOL000126 | MOL000130 |
| MOL000141 | MOL000173 | MOL000197 | MOL000198 | MOL000199 | MOL000201 |
| MOL000211 | MOL000232 | MOL000233 | MOL000254 | MOL000263 | MOL000268 |
| MOL000270 | MOL000286 | MOL000346 | MOL000357 | MOL000358 | MOL000414 |
| MOL000415 | MOL000416 | MOL000422 | MOL000437 | MOL000511 | MOL000522 |
| MOL000523 | MOL000536 | MOL000537 | MOL000561 | MOL000696 | MOL000702 |
| MOL000791 | MOL000860 | MOL000911 | MOL000920 | MOL001842 | MOL001896 |
| MOL001938 | MOL001996 | MOL002008 | MOL002037 | MOL002042 | MOL002067 |
| MOL002500 | MOL002503 | MOL002505 | MOL002930 | MOL003047 | MOL003281 |
| MOL003282 | MOL003283 | MOL003284 | MOL003285 | MOL003287 | MOL003288 |
| MOL003289 | MOL003290 | MOL003291 | MOL003292 | MOL003294 | MOL003295 |
| MOL003296 | MOL003297 | MOL003298 | MOL003299 | MOL003300 | MOL003301 |
| MOL003302 | MOL003304 | MOL003305 | MOL003306 | MOL003307 | MOL003308 |
| MOL003309 | MOL003310 | MOL003311 | MOL003312 | MOL003313 | MOL003314 |
| MOL003315 | MOL003316 | MOL003318 | MOL003319 | MOL003320 | MOL003322 |
| MOL003323 | MOL003324 | MOL003325 | MOL003326 | MOL003327 | MOL003328 |
| MOL003329 | MOL003330 | MOL003331 | MOL003332 | MOL003333 | MOL003334 |
| MOL003335 | MOL003336 | MOL003337 | MOL003338 | MOL003339 | MOL003340 |
| MOL003341 | MOL003342 | MOL003343 | MOL003344 | MOL003345 | MOL003346 |
| MOL003347 | MOL003348 | MOL003349 | MOL003350 | MOL003351 | MOL003352 |
| MOL003353 | MOL003354 | MOL003355 | MOL003356 | MOL003357 | MOL003358 |
| MOL003359 | MOL003360 | MOL003361 | MOL003362 | MOL003363 | MOL003364 |
| MOL003365 | MOL003366 | MOL003367 | MOL003368 | MOL003369 | MOL003370 |
| MOL003371 | MOL003372 | MOL003373 | MOL003374 | MOL004368 | MOL013068 |

Background colors: "Red" meant "found in both *Lonicerae Japonicae Flos* and *Scutellariae Radix*"; "Yellow" meant "found in both *Lonicerae Japonicae Flos* and *Forsythiae Fructus*"; "Blue" meant "found in both *Scutellariae Radix* and *Forsythiae Fructus*"; "Green" meant "found in all the three herbs".