

# 오령산 구성약재 성분의 Drug-likeness와 Oral bioavailability

김상균<sup>\*#</sup>, 이승호

한국한의학연구원 미래의학부

## Drug-likeness and Oral bioavailability for Chemical Compounds of Medicinal Materials Constituting Oryeong-san

Sang-Kyun Kim<sup>\*#</sup>, Seungho Lee

Future Medicine Division, Korea Institute of Oriental Medicine

### ABSTRACT

**Objectives** : Oryeong-san was composed of Alismatis Rhizoma, Atractylodis Rhizoma Alba, Poria Sclerotium, Polyporus, Cinnamomi Cortex, and known to have hundreds of chemical compounds. The aim of this study was to screen chemical compounds constituting Oryeong-san with the drug-likeness and oral bioavailability from the analysis of their physicochemical properties.

**Methods** : A list of chemical compounds of Oryeong-san was obtained from TM-MC(database of medicinal materials and chemical compounds in Northeast Asian traditional medicine). To remove redundant compounds, the SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) strings of each compound were identified. All of the physicochemical properties for the compounds were calculated using the DruLiTo(Drug Likeness Tool). Drug-likeness was estimated by QED(Quantitative Estimate of Druglikeness) and OB(Oral bioavailability) was checked based on the Veber's rules.

**Results** : A total of 475 compounds were obtained by eliminating duplication among 544 compounds of 5 medicinal materials. Analysis of the physicochemical properties revealed that the most common values were MW(molecular weight) 200~300 g/mol, ALOGP(octanol-water partition coefficient) 1~2, HBA(number of hydrogen bond acceptors) 0~1, HBD(number of hydrogen bond donors) 0, PSA(polar surface area) 0~50 angstrom, ROTB(number of rotatable bonds) 1, AROM(number of aromatic rings) 0, and ALERT(number of structural alerts) 1. QED had 93% of the values between 0.2 and 0.7, and OB had 90% of the value of TRUE.

**Conclusions** : We in this paper screened the candidate active compounds of Oryeong-san using the QED and Veber's rules. In the future, we will use the screening results to analyze the mechanism of Oryeong-san based on systems pharmacology.

**Key words** : Oryeong-san, TM-MC, drug-likeness, oral bioavailability, compound

## I. 서 론

오령산(五苓散)은 택사(澤瀉), 백출(白朮), 복령(茯苓), 저령(豬苓), 육계(肉桂)로 구성되는 처방으로, 이수삼습(利水滲濕)하고 온양화기(溫陽化氣)하는 효능이 있어 수습(水濕)이나 담음(痰飲)의 정체로 나타나는 질환에 쓰인다<sup>1)</sup>. 최근 연구들에서는 오령산 개별 약재들이 이수 효능을 가지는 것과 관련해서 신장

질환에도 효능이 있음을 실험을 통해 밝히고 있다<sup>2)</sup>. 하지만 오령산의 신장 질환에 대한 약리학적 작용 기전에 대해서는 아직 명확히 밝혀지지 않았다.

최근에는 IT 기술이 발전함에 따라 약재의 성분, 성분의 타겟, 질병 등의 정보에 대한 데이터베이스가 많이 구축이 되고 있으며, 이 정보를 네트워크로 연결하고 분석하는 시스템 약리학<sup>3,4)</sup> 연구가 증가하고 있다. 이러한 시스템 약리학 분야의 연

\*#Corresponding and First author : Sang-Kyun Kim, Korea Institute of Oriental Medicine, 1672, Yuseong-daero, Yuseong-gu, Daejeon, South Korea.

· Tel : +82-42-868-9526 · Fax : +82-42-869-2756 · E-mail : skkim@kiom.re.kr

· Received : 18 June 2018 · Revised : 04 July 2018 · Accepted : 25 September 2018

구들에서는 기존에 실험으로 밝히기 어려웠던 약물의 기전을 시스템적으로 분석하고 있다.

특히, 한의 처방들은 여러 약재들로 구성되어 있으며 각각의 약재들은 일반적으로 수십 개에서 수백 개의 성분들을 가지고 있기 때문에 이러한 방대한 정보들은 통합해서 시스템적으로 분석할 필요가 있다. 그러나 처방이 가지는 성분들의 개수가 많더라도, 실제로는 일부 유효 성분들만 치료 효과를 보이기 때문에, 신약을 개발하거나 처방의 약리학적 기전을 연구하는 경우에는 성분들의 약물동태학적 프로퍼티를 평가해서 유효 성분들의 후보들을 스크리닝하는 것이 중요하다. 이를 위해 생물학적 실험을 하게 되면 정확한 평가 결과를 얻을 수 있지만, 현실적인 비용과 시간의 제약으로 인해 일반적으로는 인실리코(in silico) 방법들을 많이 이용하고 있다. 본 논문에서는 처방의 유효 성분 후보들을 스크리닝하기 위해서 DL (Drug-likeness)과 OB (Oral bioavailability)를 사용하였다.

DL은 성분의 기능적 그룹 또는 물리적 프로퍼티가 기존 약물들과 비슷한지를 의미하며, 이는 어떤 성분이 치료 효과를 가진다고 볼 수 있는지를 판단하는 데 참고할 수 있다. 최근, DL을 측정하기 위해서 만족도 개념(Concept of desirability)을 이용한 QED(Quantitative Estimate of Druglikeness) 방법이 Bickerton et al.<sup>5)</sup>에 의해 제안되었다. QED는 기존에 기계학습을 이용하는 다른 연구들<sup>6,7)</sup>과는 달리 성분의 물리화학적 프로퍼티(Physicochemical property) 값들을 이용해서 직관적이고 간단하게 DL을 평가할 수 있는 장점을 가지고 있다. QED에서는 MW(molecular weight), ALOGP(octanol-water partition coefficient), HBA(number of hydrogen bond acceptors), HBD(number of hydrogen bond donors), PSA(polar surface area), ROTB(number of rotatable bonds), AROM(number of aromatic rings), ALERT(number of structural alerts)의 물리화학적 프로퍼티들을 이용한다.

OB는 약물의 흡수와 관련된 것으로 어떤 성분을 경구 복용해서 체내에서 순환되는 능력을 의미한다. 따라서 처방의 유효 성분들이 체내로 전달되어 약리학적 효과를 낼 수 있는지에 대한 정보를 제공할 수 있다. OB 평가를 위해서는 일반적으로 다양한 분자 프로퍼티들이 이용된다. Lipinski<sup>8)</sup>는 사람이 복용하는 약물은 대체적으로 크기가 작고 지용성이라는 것을 발견하고, 이에 기반해서 rule of five라는 규칙을 만들었다. 이 규칙은 인체의 약물동태학적 특성에 중요한 분자 프로퍼티들을 기술하고 있다. 이후에 Veber et al.<sup>9)</sup>는 rat에서 20% 이상의 OB를 가지는 성분들은 ROTB<=10이고 HBA+HBD<=12이거나 PSA<=140의 규칙을 가진다는 것을 보였으며, Hou et al.<sup>10)</sup>은 사람에게에도 동일한 규칙이 적용되는 것을 보였다. 이러한 규칙 기반의 방법 이외에도 최근 Xu et al.<sup>11)</sup>은 분자 프로퍼티들뿐만 아니라 P-glycoprotein과 cytochrome P450 효소 데이터를 이용해서 OB를 예측하는 회귀 모델을 제안하였다. 하지만 모델에 사용된 데이터가 공개되지 않아 활용하기 어려운 문제가 있다.

본 연구에서는 오령산을 구성하는 약재들의 성분들을 조사하고 성분들의 물리화학적 성질들을 분석한 후, DL과 OB를 구해서 오령산 구성성분들을 스크리닝 하는데 있다. 이 스크리닝 결과는 향후에 시스템 약리학 방법을 이용해 오령산의 작용기전을 분석하기 위한 자료로 사용할 계획이다.

## II. 연구방법

아래 Fig. 1은 본 연구에서 DL과 OB를 계산하는 과정을 그린 그림이다.

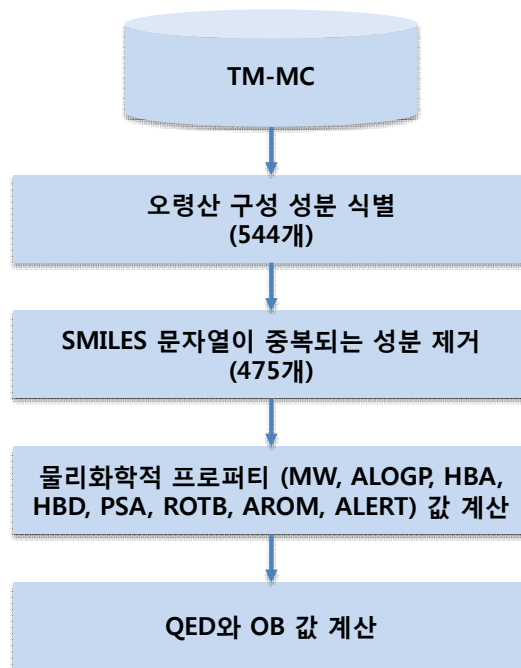


Fig. 1. Process for calculating DL and OB.

오령산 구성약재의 성분 정보는 TM-MC(database of medicinal materials and chemical compounds in Northeast Asian traditional medicine)<sup>12)</sup>에서 얻었다. TM-MC는 PubMed 데이터베이스 논문들에서 한국, 중국, 일본 약전에 수재되어 있는 약재들의 구성성분을 추출해서 제공하는 데이터베이스이다. TM-MC에는 택사 126개, 백출 174개, 복령 84개, 저령 18개, 육계 142개의 총 544개의 오령산 구성약재의 성분에 대해서 화학구조식, PubChem 링크, 추출된 PubMed 논문 링크 등의 정보들을 제공하고 있다.

본 연구에서는 이 성분들의 특성들을 분석하기 위해서 우선 개별 성분들에 대해서 SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) 문자열<sup>13)</sup>을 구했다. SMILES은 화학구조를 문자열로 기술하기 위한 명세서이다. SMILES은 성분을 유일하게 구별하기 위한 식별자가 되지는 않지만, 성분의 stereoisomer들은 동일한 SMILES 문자열을 가지게 된다. 일반적으로 stereoisomer들은 동일한 물리적 프로퍼티를 가지고, OB와 DL 값도 동일하기 때문에, 성분들의 SMILES 문자열에 대해서 중복제거를 할 필요가 있다.

544개의 구성성분들 중에 PubChem<sup>14)</sup>에서 검색되는 성분의 경우 PubChem에 나와 있는 Canonical SMILES 문자열을 가져왔다. PubChem에 없는 성분의 경우, TM-MC에서는 ChemDraw Professional v15<sup>15)</sup>를 이용해서 그린 화학구조식 파일을 제공하는데, Open Babel GUI V2.4.1<sup>16)</sup>을 이용해서 ChemDraw 바이너리 파일로부터 SMILES 문자열을 얻었다. 변환시 “Output in canonical form”과 “Do not include isotopic or chiral markings” 옵션을 체크해서 PubChem

데이터베이스의 SMILES 문자열과 유사한 결과가 나올 수 있도록 하였다.

OB와 DL 계산에 이용할 성분의 물리적 프로퍼티 값들은 DruLiTo(Drug Likeness Tool)<sup>17)</sup>를 이용해서 얻었다. DruLiTo의 입력으로는 성분들의 SDF (structure-data file) 파일이 필요한데, PubChem에서 검색되는 성분들은 PubChem에서 SDF 파일을 다운 받았으며, PubChem에 없는 성분들은 Open Babel을 이용해서 ChemDraw 바이너리 파일로부터 SDF 파일로 변환하였다. 변환시 “Add hydrogens (make explicit)”와 “Center Coordinates” 옵션을 체크하였다.

각각의 성분들에 대한 QED 값은 Bickerton et al.의 논문에서 나온 방법대로, 우선 각 화합물의 물리적 프로퍼티들(MW, ALOGP, HBA, HBD, PSA, ROTB, AROM, ALERT)에 대한 만족도 함수(desirability function)를 구하고 이들의 기하 평균값을 계산해서 얻었다.

OB는 Veber et al.이 제안한 2가지 규칙을 모두 만족하는지 여부를 판단하였다. 즉, 화합물의 ROTB가 10 이하이고, HBA와 HBD의 합이 12 이하이거나 PSA가 140이하인 성분의

OB값은 TRUE이고 아닌 경우 FALSE의 값을 가지도록 하였다.

### III. 결 과

#### 1. 오령산 성분의 물리화학적 프로퍼티 및 DL과 OB 리스트

오령산의 544개의 구성성분들에서 화학구조식이 없는 성분을 제외하면 538개의 성분들이 존재한다. 화학구조식이 없는 성분들은 procyanidin oligomer와 같은 polysaccharide이거나 germacrene나 tannin의 클래스명, atractylode I, atractylode II, atractylode III와 같이 화학구조식을 찾을 수 없는 성분들이다. 538개의 성분들에 대해서 SMILES 문자열 중복제거를 해서 총 475개의 성분을 얻었다. Table 1은 이 각각의 성분들에 대해서 MW, ALOGP, HBA, HBD, PSA, ROTB, AROM, ALERT의 물리적 프로퍼티 값들과 계산된 QED와 OB 값들을 보이고 있다. 성분들은 OB와 QED 값의 내림차순 순서로 정렬이 되어 있다.

Table 1. List of physicochemical properties, DL, and OB of chemical compounds constituting Oryeong-san.

| Name  | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA   | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|-------|--|--------|--------|-----|-----|-------|------|------|-------|-------|------|
| 백출    | atractylochromene  | 258.16 | 3.18   | 2   | 1   | 29.46 | 3    | 1    | 1     | 0.844 | TRUE |
| 백출    | butylated hydroxytoluene   | 220.18 | 4.008  | 1   | 1   | 20.23 | 2    | 1    | 0     | 0.798 | TRUE |
| 저령    | 19-norergosta-5,7,9,22-tetraen-3 $\beta$ -ol   | 380.31 | 1.998  | 1   | 1   | 20.23 | 4    | 1    | 1     | 0.793 | TRUE |
| 육계    | (2R,3R)-5,7-dimethoxy-3',4'-methylenedioxyflavan-3-ol                                  | 330.11 | -0.878 | 6   | 1   | 66.38 | 3    | 2    | 0     | 0.789 | TRUE |
| 택사    | (Z)-nuciferol  | 218.17 | 2.764  | 1   | 1   | 20.23 | 5    | 1    | 1     | 0.753 | TRUE |
| 백출    | 7-hydroxy-eudesm-4(15),11(13)-dien-2-acid  | 264.17 | 1.7    | 3   | 2   | 57.53 | 2    | 0    | 1     | 0.746 | TRUE |
| 백출    | trans-2-hydroxyisoxypyl-3-hydroxy-7-isopentene-2,3-dihydrobenzofuran-5-carboxylic acid | 306.15 | 1.426  | 5   | 3   | 86.99 | 4    | 1    | 1     | 0.733 | TRUE |
| 육계    | cinnamoid E  | 234.16 | 0.781  | 2   | 1   | 37.3  | 1    | 0    | 0     | 0.728 | TRUE |
| 택사,육계 | bisabolol  | 222.2  | 2.75   | 1   | 1   | 20.23 | 4    | 0    | 1     | 0.725 | TRUE |
| 저령    | ergosterol   | 396.34 | 2.256  | 1   | 1   | 20.23 | 4    | 0    | 1     | 0.723 | TRUE |
| 백출    | 5,7-flavonone  | 254.06 | 0.339  | 4   | 2   | 66.76 | 1    | 2    | 1     | 0.72  | TRUE |
| 저령    | (22E,24R)-ergosta-7,22-dien-3 $\beta$ -ol  | 398.35 | 1.933  | 1   | 1   | 20.23 | 4    | 0    | 1     | 0.718 | TRUE |
| 육계    | (4 $\alpha$ ,10 $\beta$ )-4,10-dihydroxy cadin-1(6)-en-5-one                           | 252.17 | 0.569  | 3   | 2   | 57.53 | 1    | 0    | 0     | 0.717 | TRUE |
| 택사    | 5 $\beta$ -eudesma-1,3-dien-11-ol  | 220.18 | 1.731  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 0    | 0     | 0.713 | TRUE |
| 복령    | 6,9-epoxy-ergosta-7,22-diene-3-ol  | 412.33 | 1.512  | 2   | 1   | 29.46 | 4    | 0    | 1     | 0.71  | TRUE |
| 육계    | isoeugenol   | 164.08 | 1.053  | 2   | 1   | 29.46 | 2    | 1    | 0     | 0.707 | TRUE |
| 택사    | $\beta$ -(Z)-curcumen-12-ol  | 220.18 | 2.939  | 1   | 1   | 20.23 | 5    | 0    | 1     | 0.706 | TRUE |
| 육계    | benzenepropionic acid  | 150.07 | 1.065  | 2   | 1   | 37.3  | 3    | 1    | 0     | 0.699 | TRUE |
| 육계    | 2-methoxycinnamic acid   | 178.06 | 0.83   | 3   | 1   | 46.53 | 3    | 1    | 1     | 0.697 | TRUE |
| 백출    | galaxolide   | 258.2  | 2.857  | 1   | 0   | 9.23  | 0    | 1    | 0     | 0.695 | TRUE |
| 백출    | 2-(4a,8-dimethyl-1,2,3,4,4a,5,6,7-octahydronaphthalen-2-yl)-prop-2-en-1-ol             | 220.18 | 1.224  | 1   | 1   | 20.23 | 2    | 0    | 1     | 0.694 | TRUE |

| Name   | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA   | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|--------|--|--------|--------|-----|-----|-------|------|------|-------|-------|------|
| 백출     | 4 $\alpha$ ,7 $\alpha$ -epoxyguaiane-10 $\alpha$ ,11-diol              | 254,19 | 0,016  | 3   | 2   | 49,69 | 1    | 0    | 0     | 0,693 | TRUE |
| 백출     | 7 $\alpha$ ,10 $\alpha$ -epoxyguaiane-4 $\alpha$ ,11-diol              | 254,19 | 0,016  | 3   | 2   | 49,69 | 1    | 0    | 0     | 0,693 | TRUE |
| 육계     | (2R,3R)-5,7,3',4'-tetramethoxyflavan-3-ol                              | 358,11 | -0,986 | 7   | 1   | 83,45 | 5    | 2    | 1     | 0,688 | TRUE |
| 택사     | orientalol E   | 254,19 | -0,118 | 3   | 2   | 49,69 | 1    | 0    | 0     | 0,686 | TRUE |
| 육계     | cinnamoid A  | 238,19 | 0,198  | 2   | 2   | 40,46 | 1    | 0    | 0     | 0,685 | TRUE |
| 백출     | 8,9-dehydro-9-formyl-cycloisolongifolene                               | 244,18 | 1,51   | 1   | 0   | 17,07 | 1    | 0    | 0     | 0,683 | TRUE |
| 백출     | (6E,12E)-tetradecadiene-8,10-diyne-1,3-diol                            | 218,13 | 1,276  | 2   | 2   | 40,46 | 5    | 0    | 1     | 0,682 | TRUE |
| 택사     | 2-cyclohexyl-2-phenyl-propane  | 202,17 | 1,463  | 0   | 0   | 0     | 2    | 1    | 0     | 0,681 | TRUE |
| 육계     | eugenol  | 164,08 | 1,175  | 2   | 1   | 29,46 | 3    | 1    | 1     | 0,679 | TRUE |
| 육계     | (-)-15-hydroxy-T-muurolol  | 238,19 | 0,273  | 2   | 2   | 40,46 | 2    | 0    | 1     | 0,678 | TRUE |
| 육계     | 15-hydroxy- $\alpha$ -cadinol  | 238,19 | 0,273  | 2   | 2   | 40,46 | 2    | 0    | 1     | 0,678 | TRUE |
| 백출     | stigmasterol   | 412,37 | 1,257  | 1   | 1   | 20,23 | 5    | 0    | 1     | 0,675 | TRUE |
| 저령     | ergone   | 392,31 | 2,866  | 1   | 0   | 17,07 | 4    | 0    | 1     | 0,673 | TRUE |
| 백출     | 6-isopropenyl-4,8a-dimethyl-1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-naphthalen-2-ol | 220,18 | 2,092  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,671 | TRUE |
| 복령     | ergosterone  | 394,32 | 2,977  | 1   | 0   | 17,07 | 4    | 0    | 1     | 0,671 | TRUE |
| 백출     | velleral   | 232,15 | 1,237  | 2   | 0   | 34,14 | 2    | 0    | 1     | 0,671 | TRUE |
| 백출     | hinesol  | 222,2  | 1,656  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,669 | TRUE |
| 복령     | ergosta-4,22-diene-3-one   | 396,34 | 2,589  | 1   | 0   | 17,07 | 4    | 0    | 1     | 0,668 | TRUE |
| 복령, 저령 | (22E,24R)-ergosta-7,22-dien-3-one                                      | 396,34 | 2,282  | 1   | 0   | 17,07 | 4    | 0    | 1     | 0,667 | TRUE |
| 복령     | poriacosone A  | 456,36 | 2,203  | 3   | 2   | 57,53 | 5    | 0    | 0     | 0,667 | TRUE |
| 택사     | alismol  | 220,18 | 1,619  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,666 | TRUE |
| 백출     | bulnesol   | 222,2  | 1,344  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,664 | TRUE |
| 택사     | khusinol   | 220,18 | 1,494  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,664 | TRUE |
| 육계     | $\alpha$ -cadinol  | 222,2  | 1,364  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,664 | TRUE |
| 택사     | $\gamma$ -eudesmol   | 222,2  | 1,295  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,663 | TRUE |
| 육계     | epi-boscialin  | 226,16 | 0,217  | 3   | 2   | 57,53 | 2    | 0    | 1     | 0,662 | TRUE |
| 택사     | 4 $\alpha$ ,10 $\alpha$ -dihydroxy-5 $\beta$ -H-guaj-6-en              | 238,19 | 0,722  | 2   | 2   | 40,46 | 1    | 0    | 1     | 0,661 | TRUE |
| 택사     | alismoxide   | 238,19 | 0,722  | 2   | 2   | 40,46 | 1    | 0    | 1     | 0,661 | TRUE |
| 택사     | germacra-4(15),5,10(14)-trien-1a-ol                                    | 220,18 | 1,34   | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,661 | TRUE |
| 택사     | $\gamma$ -cadinol  | 222,2  | 1,158  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,66  | TRUE |
| 복령     | 3 $\beta$ ,5 $\alpha$ -dihydroxy-ergosta-7,22-dien-6-one               | 428,33 | 1,061  | 3   | 2   | 57,53 | 4    | 0    | 1     | 0,659 | TRUE |
| 백출     | eudesm-4(15),7-diene-9 $\alpha$ ,11-diol                               | 236,18 | 0,707  | 2   | 2   | 40,46 | 1    | 0    | 1     | 0,658 | TRUE |
| 택사     | $\alpha$ -copaene-8-ol   | 220,18 | 1,19   | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,658 | TRUE |
| 택사     | 11,25-anhydro-alisol F   | 452,33 | 3,134  | 3   | 1   | 46,53 | 2    | 0    | 1     | 0,656 | TRUE |
| 택사, 육계 | calamenene   | 202,17 | 2,642  | 0   | 0   | 0     | 1    | 1    | 0     | 0,656 | TRUE |
| 육계     | ent-4 $\beta$ ,10 $\alpha$ -dihydroxy aromadendrane                    | 238,19 | 0,82   | 2   | 2   | 40,46 | 0    | 0    | 0     | 0,656 | TRUE |
| 택사     | $\beta$ -cadinol   | 222,2  | 1,011  | 1   | 1   | 20,23 | 1    | 0    | 1     | 0,656 | TRUE |
| 저령     | acetosyringone   | 196,07 | -0,606 | 4   | 1   | 55,76 | 3    | 1    | 1     | 0,655 | TRUE |
| 육계     | decahydro-1,1,4,7-1H-cycloprope a<br>zulene-4-ol                       | 222,2  | 1,259  | 1   | 1   | 20,23 | 0    | 0    | 0     | 0,654 | TRUE |
| 택사     | epi-globulol   | 222,2  | 1,259  | 1   | 1   | 20,23 | 0    | 0    | 0     | 0,654 | TRUE |
| 육계     | palustrol  | 222,2  | 1,259  | 1   | 1   | 20,23 | 0    | 0    | 0     | 0,654 | TRUE |
| 육계     | $\alpha$ -calacorene   | 200,16 | 2,974  | 0   | 0   | 0     | 1    | 1    | 0     | 0,653 | TRUE |
| 육계     | nerolidol  | 222,2  | 3,701  | 1   | 1   | 20,23 | 7    | 0    | 1     | 0,651 | TRUE |

| Name       | Compound  | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA   | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|------------|---|--------|--------|-----|-----|-------|------|------|-------|-------|------|
| 택사, 백출, 복령 | $\beta$ -sitosterol   | 414.39 | 1.3    | 1   | 1   | 20.23 | 6    | 0    | 1     | 0.65  | TRUE |
| 택사         | 11-anhydro-alisol F   | 470.34 | 2.114  | 4   | 2   | 66.76 | 2    | 0    | 0     | 0.649 | TRUE |
| 복령         | lanostane   | 414.42 | 3.411  | 0   | 0   | 0     | 5    | 0    | 0     | 0.647 | TRUE |
| 백출, 육계     | $\beta$ -eudesmol   | 222.2  | 0.698  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 0    | 1     | 0.647 | TRUE |
| 육계         | caryolane-1,9 $\beta$ -diol                                       | 238.19 | 0.518  | 2   | 2   | 40.46 | 0    | 0    | 0     | 0.646 | TRUE |
| 육계         | methyl eugenol  | 178.1  | 1.239  | 2   | 0   | 18.46 | 4    | 1    | 1     | 0.646 | TRUE |
| 육계         | mustakone   | 218.17 | 1.22   | 1   | 0   | 17.07 | 1    | 0    | 0     | 0.646 | TRUE |
| 택사         | alisol L  | 468.32 | 2.333  | 4   | 1   | 66.9  | 4    | 0    | 1     | 0.644 | TRUE |
| 육계         | cinnamyl alcohol  | 134.07 | 1.227  | 1   | 1   | 20.23 | 2    | 1    | 0     | 0.644 | TRUE |
| 육계         | benzenepropanol   | 136.09 | 0.534  | 1   | 1   | 20.23 | 3    | 1    | 0     | 0.642 | TRUE |
| 택사, 육계     | cinnamic acid   | 148.05 | 1.329  | 2   | 1   | 37.3  | 2    | 1    | 1     | 0.642 | TRUE |
| 육계         | cinnamoid B   | 252.17 | -0.08  | 3   | 2   | 57.53 | 1    | 0    | 1     | 0.642 | TRUE |
| 육계         | cinnamoid D   | 236.18 | 0.277  | 2   | 2   | 40.46 | 1    | 0    | 1     | 0.642 | TRUE |
| 백출         | 10 $\beta$ ,11 $\beta$ -epoxyguaiane-1 $\alpha$ ,4 $\alpha$ -diol | 254.19 | 0.016  | 3   | 2   | 49.69 | 0    | 0    | 0     | 0.64  | TRUE |
| 택사         | 11-deoxy-alisol C   | 470.34 | 2.054  | 4   | 1   | 66.9  | 4    | 0    | 1     | 0.639 | TRUE |
| 택사         | 11-deoxy-alisol D   | 472.36 | 1.994  | 4   | 1   | 62.36 | 4    | 0    | 1     | 0.636 | TRUE |
| 택사         | clovandiol  | 238.19 | 0.275  | 2   | 2   | 40.46 | 0    | 0    | 0     | 0.636 | TRUE |
| 육계         | 2-hydroxycinnamic acid  | 164.05 | 0.766  | 3   | 2   | 57.53 | 2    | 1    | 1     | 0.634 | TRUE |
| 육계         | hydroxycinnamic acid  | 164.05 | 0.766  | 3   | 2   | 57.53 | 2    | 1    | 1     | 0.634 | TRUE |
| 복령         | dehydrotrametenonic acid  | 452.33 | 4.328  | 3   | 1   | 54.37 | 5    | 0    | 1     | 0.632 | TRUE |
| 육계         | (2E,9E)-6,7-cis-dihydroxyhumulan-2,9-diene                        | 238.19 | 1.638  | 2   | 2   | 40.46 | 0    | 0    | 1     | 0.63  | TRUE |
| 육계         | clovane-2 $\beta$ ,9 $\alpha$ -diol                               | 238.19 | 0.082  | 2   | 2   | 40.46 | 0    | 0    | 0     | 0.627 | TRUE |
| 백출         | atractylenolactam   | 229.15 | 0.916  | 2   | 1   | 29.1  | 0    | 0    | 1     | 0.626 | TRUE |
| 복령         | trametenolic acid   | 456.36 | 3.35   | 3   | 2   | 57.53 | 5    | 0    | 1     | 0.624 | TRUE |
| 복령         | 3 $\beta$ -hydroxylanosta-7,9(11),24-trien-21-oic acid            | 454.34 | 3.758  | 3   | 2   | 57.53 | 5    | 0    | 1     | 0.623 | TRUE |
| 복령         | dehydrotrametenolic acid  | 454.34 | 3.758  | 3   | 2   | 57.53 | 5    | 0    | 1     | 0.623 | TRUE |
| 백출         | phenylethyl alcohol   | 122.07 | 1.015  | 1   | 1   | 20.23 | 2    | 1    | 0     | 0.62  | TRUE |
| 백출         | $\alpha$ -bergamotene   | 204.19 | 2.748  | 0   | 0   | 0     | 3    | 0    | 1     | 0.62  | TRUE |
| 백출         | juniper camphor   | 222.2  | 1.769  | 1   | 1   | 20.23 | 0    | 0    | 1     | 0.619 | TRUE |
| 택사, 백출, 육계 | $\beta$ -elemene  | 204.19 | 3.231  | 0   | 0   | 0     | 3    | 0    | 1     | 0.619 | TRUE |
| 택사         | $\delta$ -elemene   | 204.19 | 3.102  | 0   | 0   | 0     | 3    | 0    | 1     | 0.619 | TRUE |
| 백출         | $\tau$ -elemene   | 204.19 | 3.231  | 0   | 0   | 0     | 3    | 0    | 1     | 0.619 | TRUE |
| 택사         | alisanol A  | 484.32 | 1.486  | 5   | 2   | 91.67 | 5    | 0    | 0     | 0.617 | TRUE |
| 백출         | $\beta$ -sesquiphellandrene                                       | 204.19 | 3.192  | 0   | 0   | 0     | 4    | 0    | 1     | 0.617 | TRUE |
| 육계         | linalool  | 154.14 | 2.469  | 1   | 1   | 20.23 | 4    | 0    | 1     | 0.616 | TRUE |
| 택사, 백출, 육계 | spathulenol   | 220.18 | 1.716  | 1   | 1   | 20.23 | 0    | 0    | 1     | 0.616 | TRUE |
| 백출         | 1,1-biphenyl, 4-methyl-   | 168.09 | 2.862  | 0   | 0   | 0     | 1    | 2    | 0     | 0.614 | TRUE |
| 택사         | cadala-1(10),3,8-triene   | 202.17 | 2.354  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 0     | 0.612 | TRUE |
| 택사         | 1H-indole-3-carboxylic acid                                       | 161.05 | -0.148 | 3   | 2   | 49.33 | 1    | 2    | 0     | 0.611 | TRUE |
| 택사         | $\delta$ -selinene  | 204.19 | 1.797  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 0     | 0.611 | TRUE |
| 택사         | alisanol B  | 468.32 | 2.587  | 4   | 2   | 74.6  | 5    | 0    | 1     | 0.609 | TRUE |

| Name   | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA   | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|--------|--|--------|--------|-----|-----|-------|------|------|-------|-------|------|
| 복령     | dehydroeburonic acid   | 466.34 | 3.663  | 3   | 1   | 54.37 | 6    | 0    | 1     | 0.608 | TRUE |
| 택사     | 25-anhydro-alisol F  | 470.34 | 2.088  | 4   | 2   | 66.76 | 2    | 0    | 1     | 0.607 | TRUE |
| 택사     | 1,4-dimethyl-7-(1-methylethyl)-azulene   | 198.14 | 3.218  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 0     | 0.606 | TRUE |
| 백출     | atractylodin   | 182.07 | 2.37   | 1   | 0   | 9.23  | 1    | 1    | 1     | 0.606 | TRUE |
| 택사     | isolongifolen-9-one  | 218.17 | 1.728  | 1   | 0   | 17.07 | 0    | 0    | 0     | 0.605 | TRUE |
| 육계     | safrole  | 162.07 | 1.04   | 2   | 0   | 18.46 | 2    | 1    | 1     | 0.605 | TRUE |
| 백출     | 9H-fluoren-9-one   | 180.06 | 1.761  | 1   | 0   | 17.07 | 0    | 2    | 0     | 0.603 | TRUE |
| 백출     | 2-(3-isopropyl-4-methyl-pent-3-en-1-ynyl)-2-methyl-cyclobutanone                   | 204.15 | 2.63   | 1   | 0   | 17.07 | 1    | 0    | 1     | 0.6   | TRUE |
| 택사     | orientalol A   | 254.19 | -0.166 | 3   | 3   | 60.69 | 2    | 0    | 1     | 0.6   | TRUE |
| 택사     | $\gamma$ -elemene  | 204.19 | 3.809  | 0   | 0   | 0     | 2    | 0    | 1     | 0.6   | TRUE |
| 백출     | longiverbenone   | 218.17 | 1.29   | 1   | 0   | 17.07 | 0    | 0    | 0     | 0.598 | TRUE |
| 백출     | 1,2,4-benzenetricarboxylic acid, 1,2-dimethyl ester                                | 238.05 | 0.599  | 6   | 1   | 89.9  | 5    | 1    | 2     | 0.596 | TRUE |
| 백출     | 1H-benzimidazole, 5,6-dimethyl-  | 146.08 | 0.857  | 2   | 1   | 24.39 | 0    | 2    | 0     | 0.596 | TRUE |
| 백출     | ethanone, 2-hydroxy-1-phenyl-  | 136.05 | 0.282  | 2   | 1   | 37.3  | 2    | 1    | 1     | 0.593 | TRUE |
| 백출     | atractylon   | 216.15 | 1.197  | 1   | 0   | 9.23  | 0    | 1    | 1     | 0.592 | TRUE |
| 백출     | biphenyl   | 154.08 | 2.416  | 0   | 0   | 0     | 1    | 2    | 0     | 0.591 | TRUE |
| 택사     | menthol  | 156.15 | 0.656  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 0    | 0     | 0.591 | TRUE |
| 복령     | dehydroeburicoic acid  | 468.36 | 3.094  | 3   | 2   | 57.53 | 6    | 0    | 1     | 0.59  | TRUE |
| 복령     | eburicoic acid   | 470.38 | 2.685  | 3   | 2   | 57.53 | 6    | 0    | 1     | 0.588 | TRUE |
| 백출     | phenol, 4-ethyl-   | 122.07 | 0.952  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 1    | 0     | 0.588 | TRUE |
| 백출     | (3E,5E)-7-isopropyl-8-methyl-3,5,7-natrien-2-one                                   | 190.17 | 4.023  | 0   | 0   | 0     | 4    | 0    | 1     | 0.587 | TRUE |
| 육계     | (3S,5R,6S,7E)-3,5,6-trihydroxy-7-megastigmen-9-one                                 | 242.15 | -0.222 | 4   | 3   | 77.76 | 2    | 0    | 1     | 0.585 | TRUE |
| 택사     | alisol C   | 486.33 | 1.288  | 5   | 2   | 87.13 | 4    | 0    | 1     | 0.585 | TRUE |
| 백출     | tetramethylnaphthalene   | 184.13 | 3.733  | 0   | 0   | 0     | 0    | 2    | 0     | 0.585 | TRUE |
| 택사     | 13,17-epoxy-alisol B   | 488.35 | 1.227  | 5   | 2   | 82.59 | 4    | 0    | 1     | 0.582 | TRUE |
| 복령, 저령 | 3 $\beta$ ,5 $\alpha$ ,6 $\beta$ -trihydroxyl-ergosta-7,22-diene                   | 430.34 | 0.921  | 3   | 3   | 60.69 | 4    | 0    | 1     | 0.582 | TRUE |
| 백출     | benzene, 1,3-diethenyl-  | 130.08 | 2.427  | 0   | 0   | 0     | 2    | 1    | 0     | 0.576 | TRUE |
| 백출     | benzene, 1,4-diethyl-  | 134.11 | 1.626  | 0   | 0   | 0     | 2    | 1    | 0     | 0.576 | TRUE |
| 택사, 백출 | $\alpha$ -selinene   | 204.19 | 2.602  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.576 | TRUE |
| 택사     | 2 $\beta$ ,4 $\beta$ ,10 $\alpha$ -trihydroxy-1 $\alpha$ H,5 $\beta$ H-guaia-6-ene | 254.19 | -0.044 | 3   | 3   | 60.69 | 1    | 0    | 1     | 0.575 | TRUE |
| 백출     | $\alpha$ -guaiene  | 204.19 | 2.342  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.575 | TRUE |
| 택사, 육계 | $\alpha$ -muurolene  | 204.19 | 2.407  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.575 | TRUE |
| 택사, 육계 | $\gamma$ -cadinene   | 204.19 | 2.26   | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.575 | TRUE |
| 육계     | benzyl benzoate  | 212.08 | 2.336  | 2   | 0   | 26.3  | 4    | 2    | 2     | 0.574 | TRUE |
| 육계     | cadinene   | 204.19 | 2.211  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.574 | TRUE |
| 택사     | $\beta$ -cadinene  | 204.19 | 2.201  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.574 | TRUE |
| 육계     | $\delta$ -cadinene   | 204.19 | 2.211  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.574 | TRUE |
| 백출     | 2-methylene-5-(1-methylvinyl)-8-methyl-bicyclo[5.3.0]decane                        | 204.19 | 2.044  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.573 | TRUE |
| 택사     | 25-O-methylalisol F  | 502.37 | 1.477  | 5   | 2   | 75.99 | 3    | 0    | 1     | 0.573 | TRUE |
| 백출     | atractylenolide VI   | 202.17 | 2.558  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.573 | TRUE |

| Name  | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA   | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|-------|--|--------|--------|-----|-----|-------|------|------|-------|-------|------|
| 복령    | 3-oxo-16 $\alpha$ -hydroxy-lanosta-7,9(11),24(31)-trien-21-oic acid        | 482.34 | 2.897  | 4   | 2   | 74.6  | 6    | 0    | 1     | 0.572 | TRUE |
| 백출    | benzene, 2-methoxy-1,3-dimethyl-   | 136.09 | 1.798  | 1   | 0   | 9.23  | 1    | 1    | 0     | 0.572 | TRUE |
| 복령    | polyporenic acid C   | 482.34 | 2.897  | 4   | 2   | 74.6  | 6    | 0    | 1     | 0.572 | TRUE |
| 택사,육계 | copaene  | 204.19 | 1.763  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.571 | TRUE |
| 육계    | isothujol  | 154.14 | 0.175  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 0    | 0     | 0.571 | TRUE |
| 육계    | sativene   | 204.19 | 1.777  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.571 | TRUE |
| 택사,육계 | $\alpha$ -cubebene   | 204.19 | 1.645  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.57  | TRUE |
| 백출    | $\beta$ -selinene  | 204.19 | 1.718  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.57  | TRUE |
| 백출    | naphthalene, 1,6,7-trimethyl-  | 170.11 | 3.287  | 0   | 0   | 0     | 0    | 2    | 0     | 0.569 | TRUE |
| 저령    | (22E,24R)-ergosta-6-en-3 $\beta$ ,5 $\alpha$ ,6 $\beta$ -triol             | 432.36 | 0.964  | 3   | 3   | 60.69 | 5    | 0    | 1     | 0.568 | TRUE |
| 백출    | decane, 2,5,9-trimethyl-   | 184.22 | 2.014  | 0   | 0   | 0     | 7    | 0    | 0     | 0.567 | TRUE |
| 육계    | benzenepropanal  | 134.07 | 1.113  | 1   | 0   | 17.07 | 3    | 1    | 1     | 0.566 | TRUE |
| 육계    | benzyl alcohol   | 108.06 | 0.759  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 1    | 0     | 0.563 | TRUE |
| 복령    | ergosta-5,6-epoxy-7,22-dien-3-ol   | 412.33 | 1.687  | 2   | 1   | 32.76 | 4    | 0    | 2     | 0.563 | TRUE |
| 육계    | patchulane   | 206.2  | 1.362  | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 0     | 0.561 | TRUE |
| 육계    | terpinen-4-ol  | 154.14 | 1.122  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 0    | 1     | 0.561 | TRUE |
| 육계    | $\alpha$ -terpineol  | 154.14 | 1.122  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 0    | 1     | 0.561 | TRUE |
| 육계    | $\beta$ -cubebene  | 204.19 | 1.046  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.56  | TRUE |
| 백출    | 2-[(2E)-3,7-dimethyl-2,6-octadienyl]-6-methyl-2,5 cyclohexadiene-1,4-dione | 258.16 | 3.555  | 2   | 0   | 34.14 | 5    | 0    | 2     | 0.558 | TRUE |
| 택사    | aromadendrene oxide  | 220.18 | 1.137  | 1   | 0   | 12.53 | 0    | 0    | 1     | 0.558 | TRUE |
| 육계    | 1-methyl-4-(1-methylethyl)-2-cyclohexen-1-ol                               | 154.14 | 0.94   | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 0    | 1     | 0.557 | TRUE |
| 육계    | isosativene  | 204.19 | 0.847  | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.555 | TRUE |
| 육계    | 4-ethyl-o-xylene   | 134.11 | 2.407  | 0   | 0   | 0     | 1    | 1    | 0     | 0.553 | TRUE |
| 백출    | benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-   | 134.11 | 2.407  | 0   | 0   | 0     | 1    | 1    | 0     | 0.553 | TRUE |
| 백출    | benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-   | 134.11 | 2.407  | 0   | 0   | 0     | 1    | 1    | 0     | 0.553 | TRUE |
| 육계    | endo-fenchyl alcohol   | 154.14 | 1.009  | 1   | 1   | 20.23 | 0    | 0    | 0     | 0.552 | TRUE |
| 백출    | o-cymene   | 134.11 | 2.227  | 0   | 0   | 0     | 1    | 1    | 0     | 0.552 | TRUE |
| 복령    | 3 $\beta$ ,5 $\alpha$ ,9 $\alpha$ -trihydroxy-ergosta-7,22-diene-6-one     | 444.32 | 0.446  | 4   | 3   | 77.76 | 4    | 0    | 1     | 0.551 | TRUE |
| 육계    | borneol  | 154.14 | 0.943  | 1   | 1   | 20.23 | 0    | 0    | 0     | 0.55  | TRUE |
| 택사    | 16-oxo-11-anhydro-alisol A   | 486.33 | 1.567  | 5   | 3   | 94.83 | 5    | 0    | 0     | 0.549 | TRUE |
| 육계    | p-hydroxybenzaldehyde  | 122.04 | 0.452  | 2   | 1   | 37.3  | 1    | 1    | 1     | 0.549 | TRUE |
| 백출    | l-menthone   | 154.14 | 0.844  | 1   | 0   | 17.07 | 1    | 0    | 0     | 0.547 | TRUE |
| 백출    | diphenylacetylene  | 178.08 | 3.006  | 0   | 0   | 0     | 0    | 2    | 1     | 0.544 | TRUE |
| 택사    | 16-oxo-11-deoxy-alisol A   | 488.35 | 1.287  | 5   | 3   | 94.83 | 5    | 0    | 0     | 0.543 | TRUE |
| 백출    | cyclohexane, (3-methylpentyl)-   | 168.19 | -0.251 | 0   | 0   | 0     | 4    | 0    | 0     | 0.543 | TRUE |
| 육계    | sabinol  | 152.12 | 0.457  | 1   | 1   | 20.23 | 1    | 0    | 1     | 0.541 | TRUE |
| 복령    | 3 $\beta$ ,16 $\alpha$ -dihydroxylanosta-7,9(11),24-trien-21-oic acid      | 470.34 | 2.992  | 4   | 3   | 77.76 | 5    | 0    | 1     | 0.54  | TRUE |
| 육계    | camphene hydrate   | 154.14 | 0.57   | 1   | 1   | 20.23 | 0    | 0    | 0     | 0.54  | TRUE |
| 육계    | 2-phenyl-1,3-butadiene   | 130.08 | 2.427  | 0   | 0   | 0     | 2    | 1    | 1     | 0.539 | TRUE |
| 택사    | orientalol C   | 236.18 | 0.778  | 2   | 1   | 32.76 | 1    | 0    | 2     | 0.539 | TRUE |
| 복령    | 16 $\alpha$ -hydroxytrametenolic acid                                      | 472.36 | 2.583  | 4   | 3   | 77.76 | 5    | 0    | 1     | 0.538 | TRUE |

| Name       | Compound   | MW     | ALOGP | HBA | HBD | PSA   | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|------------|--|--------|-------|-----|-----|-------|------|------|-------|-------|------|
| 백출         | nonane, 2,6-dimethyl-  | 156.19 | 0.948 | 0   | 0   | 0     | 6    | 0    | 0     | 0.537 | TRUE |
| 백출         | 1,3,3-trimethyl-2-(2-methyl-cyclopropyl)-cyclohexene                   | 178.17 | 1.631 | 0   | 0   | 0     | 1    | 0    | 1     | 0.535 | TRUE |
| 육계         | 2-hydroxy-4-methoxyl-cinnamaldehyde                                    | 178.06 | 0.315 | 3   | 1   | 46.53 | 3    | 1    | 2     | 0.535 | TRUE |
| 택사         | alisol G   | 472.36 | 1.895 | 4   | 3   | 77.76 | 5    | 0    | 1     | 0.535 | TRUE |
| 저령         | 24-ethyl-cholesta-7,22-dien-3 $\beta$ , 5 $\alpha$ , 6 $\beta$ -triol  | 444.36 | 0.244 | 3   | 3   | 60.69 | 5    | 0    | 1     | 0.533 | TRUE |
| 육계         | benzeneacetaldehyde  | 120.06 | 1.05  | 1   | 0   | 17.07 | 2    | 1    | 1     | 0.533 | TRUE |
| 택사, 육계     | cedrene  | 204.19 | 2.484 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.532 | TRUE |
| 백출         | longifolene-(V4)   | 204.19 | 2.818 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.532 | TRUE |
| 백출         | $\alpha$ -gurjunene  | 204.19 | 2.525 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.532 | TRUE |
| 백출         | benzene, 1-ethyl-2-methyl-   | 120.09 | 1.961 | 0   | 0   | 0     | 1    | 1    | 0     | 0.531 | TRUE |
| 백출         | dehydro-aromadendrene  | 204.19 | 2.302 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.531 | TRUE |
| 백출         | eudesma-3,7(11)-diene  | 204.19 | 3.18  | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.531 | TRUE |
| 택사, 백출, 육계 | $\beta$ -caryophyllene   | 204.19 | 3.229 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.531 | TRUE |
| 백출         | $\gamma$ -selinene   | 204.19 | 2.297 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.531 | TRUE |
| 택사         | 11-deoxy-alisol A  | 474.37 | 1.641 | 4   | 3   | 77.76 | 5    | 0    | 1     | 0.53  | TRUE |
| 백출         | 4,5-dehydro-isolongifolene   | 202.17 | 2.803 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.53  | TRUE |
| 택사         | 8,9-dehydro-neoisolongifolene  | 202.17 | 2.803 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.53  | TRUE |
| 백출         | aromadendrene  | 204.19 | 2.155 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.53  | TRUE |
| 택사, 백출     | isolede  | 204.19 | 2.051 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.53  | TRUE |
| 육계         | m-methylacetophenone   | 134.07 | 1.4   | 1   | 0   | 17.07 | 1    | 1    | 1     | 0.53  | TRUE |
| 백출         | phenol, 2-methyl-  | 108.06 | 1.287 | 1   | 1   | 20.23 | 0    | 1    | 0     | 0.53  | TRUE |
| 백출         | thujapsene-13  | 204.19 | 2.079 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.53  | TRUE |
| 택사, 백출     | $\beta$ -patchoulene   | 204.19 | 2.047 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.53  | TRUE |
| 백출         | 7,7-dimethyl-1-vinylbicyclo[2.2.1]heptan-2-one                         | 164.12 | 1.035 | 1   | 0   | 17.07 | 1    | 0    | 1     | 0.529 | TRUE |
| 육계         | 3-phenyl-2-propyn-1-ol   | 132.06 | 1.35  | 1   | 1   | 20.23 | 0    | 1    | 1     | 0.528 | TRUE |
| 택사         | succinic acid  | 118.03 | -0.41 | 4   | 2   | 74.6  | 3    | 0    | 0     | 0.528 | TRUE |
| 백출         | $\beta$ -vatirenene  | 202.17 | 3.346 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.528 | TRUE |
| 백출         | cyclohexene, 1-isopentyl-  | 152.16 | 0.905 | 0   | 0   | 0     | 3    | 0    | 1     | 0.527 | TRUE |
| 복령         | triterpene acid  | 444.36 | 0.842 | 3   | 3   | 60.69 | 1    | 0    | 1     | 0.526 | TRUE |
| 육계         | methyl heptenone   | 126.1  | 1.593 | 1   | 0   | 17.07 | 3    | 0    | 1     | 0.525 | TRUE |
| 택사         | $\gamma$ -patchoulene  | 204.19 | 1.548 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.525 | TRUE |
| 육계         | 3-cyclohexyl-4-penten-2-one  | 166.14 | -0.35 | 1   | 0   | 17.07 | 3    | 0    | 1     | 0.524 | TRUE |
| 복령         | 16 $\alpha$ -hydroxyeburonic acid                                      | 456.29 | 1.219 | 5   | 3   | 94.83 | 6    | 0    | 1     | 0.523 | TRUE |
| 택사         | 11-deoxy-alisol B  | 456.36 | 2.408 | 3   | 1   | 49.83 | 4    | 0    | 2     | 0.522 | TRUE |
| 복령         | 3-oxo-6,16 $\alpha$ -dihydroxylanosta-7,9(11),24(31)-trien-21-oic acid | 484.32 | 2.988 | 5   | 3   | 94.83 | 5    | 0    | 1     | 0.522 | TRUE |
| 육계         | 2-methylcumarone   | 132.06 | 1.067 | 1   | 0   | 9.23  | 0    | 2    | 0     | 0.52  | TRUE |
| 백출         | carvone  | 150.1  | 1.595 | 1   | 0   | 17.07 | 1    | 0    | 1     | 0.519 | TRUE |
| 백출         | $\alpha$ -caryophyllene  | 204.19 | 4.171 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.519 | TRUE |
| 육계         | longicyclene   | 204.19 | 1.027 | 0   | 0   | 0     | 0    | 0    | 1     | 0.517 | TRUE |
| 백출         | undecane, 4,7-dimethyl-  | 184.22 | 0.528 | 0   | 0   | 0     | 8    | 0    | 0     | 0.516 | TRUE |
| 육계         | 3,3',4,4'-tetrahydroxy biphenyl  | 218.06 | 0.163 | 4   | 4   | 80.92 | 1    | 2    | 1     | 0.514 | TRUE |



| Name  | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA    | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|-------|--|--------|--------|-----|-----|--------|------|------|-------|-------|------|
| 택사    | alisol X   | 454.34 | 2.687  | 3   | 1   | 54.37  | 5    | 0    | 2     | 0.514 | TRUE |
| 육계    | cinnamyl acetate   | 176.08 | 1.606  | 2   | 0   | 26.3   | 4    | 1    | 2     | 0.514 | TRUE |
| 백출    | $\alpha$ -phellandrene   | 136.13 | 1.711  | 0   | 0   | 0      | 1    | 0    | 0     | 0.514 | TRUE |
| 택사    | chiloscyphone  | 218.17 | 2.252  | 1   | 0   | 17.07  | 2    | 0    | 2     | 0.513 | TRUE |
| 육계    | 1,8-cineole  | 154.14 | 1.311  | 1   | 0   | 9.23   | 0    | 0    | 0     | 0.511 | TRUE |
| 택사    | 2,2,6-trimethyl-1-(3-oxo-but-1-enyl)-7-oxa-bicyclo-[4,1,0]-hept-4-en-3-one | 220.11 | 0.834  | 3   | 0   | 46.67  | 2    | 0    | 2     | 0.511 | TRUE |
| 백출    | 8-isopropylidene-bicyclo[4,3,0]nonan-2-one                                 | 178.14 | 1.291  | 1   | 0   | 17.07  | 0    | 0    | 1     | 0.511 | TRUE |
| 백출    | benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-  | 134.11 | 3.189  | 0   | 0   | 0      | 0    | 1    | 0     | 0.511 | TRUE |
| 복령    | masticadienoic acid  | 454.34 | 3.558  | 3   | 1   | 54.37  | 5    | 0    | 2     | 0.511 | TRUE |
| 백출    | cyclopenta(def) phenanthrenone   | 204.06 | 1.837  | 1   | 0   | 17.07  | 0    | 3    | 1     | 0.51  | TRUE |
| 복령    | 3-oxo-6,16 $\alpha$ -dihydroxytrametenolic acid                            | 512.28 | 0.974  | 7   | 2   | 125.81 | 6    | 0    | 1     | 0.509 | TRUE |
| 백출    | naphthalene  | 128.06 | 1.948  | 0   | 0   | 0      | 0    | 2    | 0     | 0.508 | TRUE |
| 백출    | nonane, 3,7-dimethyl-  | 156.19 | 0.017  | 0   | 0   | 0      | 6    | 0    | 0     | 0.508 | TRUE |
| 택사    | alisol F   | 488.35 | 1.068  | 5   | 3   | 86.99  | 2    | 0    | 1     | 0.507 | TRUE |
| 복령    | dehydrotumulolic acid  | 484.36 | 2.327  | 4   | 3   | 77.76  | 6    | 0    | 1     | 0.506 | TRUE |
| 택사    | 11-deoxy-13,17-epoxy-alisol A  | 490.37 | 1.227  | 5   | 3   | 90.29  | 5    | 0    | 1     | 0.505 | TRUE |
| 육계    | camphor  | 152.12 | 0.969  | 1   | 0   | 17.07  | 0    | 0    | 0     | 0.505 | TRUE |
| 백출    | phenol   | 94.04  | 0.84   | 1   | 1   | 20.23  | 0    | 1    | 0     | 0.505 | TRUE |
| 백출,육계 | acetophenone   | 120.06 | 0.954  | 1   | 0   | 17.07  | 1    | 1    | 1     | 0.504 | TRUE |
| 복령    | tumulolic acid   | 486.37 | 1.919  | 4   | 3   | 77.76  | 6    | 0    | 1     | 0.502 | TRUE |
| 택사    | alismorientol A  | 272.2  | -0.884 | 4   | 4   | 80.92  | 1    | 0    | 0     | 0.499 | TRUE |
| 택사    | 2-pentyl furan   | 138.1  | -0.743 | 1   | 0   | 9.23   | 4    | 1    | 1     | 0.498 | TRUE |
| 육계    | 2-hydroxycinnamaldehyde  | 148.05 | 0.813  | 2   | 1   | 37.3   | 2    | 1    | 2     | 0.497 | TRUE |
| 백출    | cyclohexane, 1-methyl-2-propyl-  | 140.16 | -0.219 | 0   | 0   | 0      | 2    | 0    | 0     | 0.497 | TRUE |
| 복령    | masticadienolic acid   | 456.36 | 2.988  | 3   | 2   | 57.53  | 5    | 0    | 2     | 0.494 | TRUE |
| 육계    | exo-isocamphanone  | 152.12 | 0.43   | 1   | 0   | 17.07  | 0    | 0    | 0     | 0.492 | TRUE |
| 백출    | bicyclo[2,2,1]heptane, 2-methyl-3-(1-methylethenyl)-                       | 150.14 | 1.118  | 0   | 0   | 0      | 1    | 0    | 1     | 0.491 | TRUE |
| 육계    | protocatechuic acid  | 154.03 | -0.158 | 4   | 3   | 77.76  | 1    | 1    | 1     | 0.491 | TRUE |
| 복령    | 6 $\alpha$ -hydroxypolyporenic acid C                                      | 498.33 | 2.324  | 5   | 3   | 94.83  | 6    | 0    | 1     | 0.489 | TRUE |
| 택사    | 3-buten-2-one, 4-(5,5-dimethyl-1-oxaspiro[2,5]-oct-4-yl)                   | 208.15 | 0.493  | 2   | 0   | 29.6   | 2    | 0    | 2     | 0.488 | TRUE |
| 육계    | benzaldehyde   | 106.04 | 1.015  | 1   | 0   | 17.07  | 1    | 1    | 1     | 0.488 | TRUE |
| 육계    | 2-methoxycinnamaldehyde  | 162.07 | 0.878  | 2   | 0   | 26.3   | 3    | 1    | 2     | 0.487 | TRUE |
| 육계    | 4-methoxycinnamaldehyde  | 162.07 | 0.878  | 2   | 0   | 26.3   | 3    | 1    | 2     | 0.487 | TRUE |
| 백출    | atractylentrid   | 232.11 | 0.888  | 3   | 3   | 60.69  | 5    | 0    | 2     | 0.487 | TRUE |
| 복령    | 16-deoxyporicoic acid B  | 468.32 | 4.592  | 4   | 2   | 74.6   | 9    | 0    | 1     | 0.486 | TRUE |
| 육계    | $\gamma$ -terpinene  | 136.13 | 2.402  | 0   | 0   | 0      | 1    | 0    | 1     | 0.485 | TRUE |
| 육계    | (E)-2-hydroxy-phenylpropionic acid cinnamoyl ester                         | 296.1  | 2.351  | 4   | 1   | 63.6   | 7    | 2    | 3     | 0.484 | TRUE |
| 백출,육계 | limonene   | 136.13 | 2.142  | 0   | 0   | 0      | 1    | 0    | 1     | 0.484 | TRUE |
| 택사    | alisol B   | 472.36 | 1.641  | 4   | 2   | 70.06  | 4    | 0    | 2     | 0.483 | TRUE |
| 육계    | 4,5-dihydroxy-3-methyl cyclohex-2-enone                                    | 142.06 | -0.443 | 3   | 2   | 57.53  | 0    | 0    | 0     | 0.482 | TRUE |
| 복령    | poricoic acid ZH   | 500.35 | 1.571  | 5   | 3   | 94.83  | 6    | 0    | 1     | 0.482 | TRUE |

| Name  | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA    | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|-------|--|--------|--------|-----|-----|--------|------|------|-------|-------|------|
| 육계    | pulegone   | 152.12 | 1.583  | 1   | 0   | 17.07  | 0    | 0    | 1     | 0.481 | TRUE |
| 백출    | 2-furancarboxaldehyde, 5-methyl-                         | 110.04 | 0.135  | 2   | 0   | 26.3   | 1    | 1    | 1     | 0.48  | TRUE |
| 백출    | 5-methyl-1-heptanol                                      | 130.14 | -0.872 | 1   | 1   | 20.23  | 5    | 0    | 1     | 0.479 | TRUE |
| 육계    | hexanoic acid  | 116.08 | -1.018 | 2   | 1   | 37.3   | 4    | 0    | 1     | 0.477 | TRUE |
| 육계    | O-dimethylbenzene  | 106.08 | 2.296  | 0   | 0   | 0      | 0    | 1    | 0     | 0.476 | TRUE |
| 택사    | 25-O-methylalisol A                                      | 504.38 | 1.283  | 5   | 3   | 86.99  | 6    | 0    | 1     | 0.475 | TRUE |
| 택사    | 16,23-oxido-alisol B                                     | 470.34 | 1.835  | 4   | 1   | 59.06  | 1    | 0    | 2     | 0.47  | TRUE |
| 육계    | heptanoic acid   | 130.1  | -1.306 | 2   | 1   | 37.3   | 5    | 0    | 1     | 0.469 | TRUE |
| 복령    | 29-hydroxypolyporenic acid C                             | 498.33 | 1.806  | 5   | 3   | 94.83  | 7    | 0    | 1     | 0.466 | TRUE |
| 저령    | polyurusterone F   | 462.33 | 0.101  | 5   | 4   | 97.99  | 5    | 0    | 0     | 0.465 | TRUE |
| 택사    | alisol O   | 512.35 | 2.493  | 5   | 1   | 72.83  | 4    | 0    | 2     | 0.463 | TRUE |
| 복령    | poricoic acid C  | 482.34 | 3.927  | 4   | 2   | 74.6   | 10   | 0    | 1     | 0.463 | TRUE |
| 백출    | cis,cis-1,6-dimethylspiro[4.5]decane                     | 166.17 | -0.331 | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 0     | 0.462 | TRUE |
| 백출    | cyclobutene, 2-propenylidene-                            | 92.06  | 1.769  | 0   | 0   | 0      | 1    | 0    | 0     | 0.462 | TRUE |
| 백출    | trans-decalin, 2-methyl-                                 | 152.16 | 0.03   | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 0     | 0.459 | TRUE |
| 백출    | 3- $\beta$ -acetoxyatractylone                           | 274.16 | 1.003  | 3   | 0   | 35.53  | 2    | 1    | 3     | 0.458 | TRUE |
| 백출    | cyclohexane, 1-ethyl-1-methyl-                           | 126.14 | -0.16  | 0   | 0   | 0      | 1    | 0    | 0     | 0.458 | TRUE |
| 백출    | toluene  | 92.06  | 1.85   | 0   | 0   | 0      | 0    | 1    | 0     | 0.458 | TRUE |
| 육계    | 1-phenyl-1,2-propanedione                                | 148.05 | 0.69   | 2   | 0   | 34.14  | 2    | 1    | 2     | 0.456 | TRUE |
| 육계    | octanoic acid  | 144.12 | -1.594 | 2   | 1   | 37.3   | 6    | 0    | 1     | 0.456 | TRUE |
| 택사    | alisol I   | 454.34 | 2.601  | 3   | 0   | 38.83  | 1    | 0    | 2     | 0.452 | TRUE |
| 백출,육계 | 1,5,5,8-tetramethyl-12-oxabicyclo[9.1.0]dodeca-3,7-diene | 220.18 | 2.404  | 1   | 0   | 12.53  | 0    | 0    | 2     | 0.451 | TRUE |
| 백출    | caryophyllene oxide                                      | 220.18 | 1.914  | 1   | 0   | 12.53  | 0    | 0    | 2     | 0.449 | TRUE |
| 육계    | terpinolen   | 136.13 | 2.721  | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 1     | 0.449 | TRUE |
| 택사    | germacrone   | 218.17 | 3.599  | 1   | 0   | 17.07  | 0    | 0    | 2     | 0.448 | TRUE |
| 백출    | selina-4(14),7(11)-dien-8-one                            | 218.17 | 1.943  | 1   | 0   | 17.07  | 0    | 0    | 2     | 0.448 | TRUE |
| 육계    | 2-carene   | 136.13 | 1.981  | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 1     | 0.447 | TRUE |
| 택사    | 25-O-ethylalisol A                                       | 518.4  | 1.534  | 5   | 3   | 86.99  | 7    | 0    | 1     | 0.446 | TRUE |
| 백출    | decalin, syn-1-methyl-, cis-                             | 152.16 | -0.32  | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 0     | 0.446 | TRUE |
| 백출    | 7-hydroxycoumarin  | 162.03 | 0.468  | 3   | 1   | 46.53  | 0    | 1    | 2     | 0.445 | TRUE |
| 육계    | cis-4-hydroxymellein                                     | 194.06 | -0.152 | 4   | 2   | 66.76  | 0    | 1    | 2     | 0.445 | TRUE |
| 백출    | furfural   | 96.02  | -0.379 | 2   | 0   | 26.3   | 1    | 1    | 1     | 0.445 | TRUE |
| 백출    | ethyl 3-(4-hydroxyphenyl) acrylate                       | 192.08 | 1.267  | 3   | 1   | 46.53  | 4    | 1    | 3     | 0.443 | TRUE |
| 육계    | $\alpha$ -pinene   | 136.13 | 1.516  | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 1     | 0.443 | TRUE |
| 육계    | farnesene  | 204.19 | 4.473  | 0   | 0   | 0      | 6    | 0    | 2     | 0.442 | TRUE |
| 백출    | nonane, 4-methyl-  | 142.17 | -0.405 | 0   | 0   | 0      | 6    | 0    | 1     | 0.442 | TRUE |
| 백출,육계 | camphene   | 136.13 | 1.387  | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 1     | 0.441 | TRUE |
| 육계    | $\beta$ -pinene  | 136.13 | 1.369  | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 1     | 0.441 | TRUE |
| 백출    | atractylenolide VII                                      | 262.19 | 1.585  | 2   | 0   | 26.3   | 3    | 0    | 3     | 0.438 | TRUE |
| 육계    | cinnamaldehyde   | 132.06 | 1.376  | 1   | 0   | 17.07  | 2    | 1    | 2     | 0.438 | TRUE |
| 복령    | poricoic acid G  | 486.33 | 3.417  | 5   | 3   | 94.83  | 9    | 0    | 1     | 0.435 | TRUE |
| 택사    | 16-oxo-alisol A  | 504.35 | 0.521  | 6   | 4   | 115.06 | 5    | 0    | 0     | 0.434 | TRUE |
| 육계    | 3-furaldehyde  | 96.02  | -0.649 | 2   | 0   | 26.3   | 1    | 1    | 1     | 0.434 | TRUE |

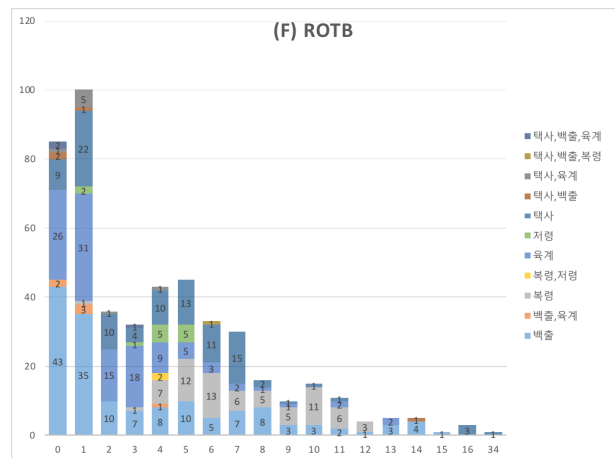
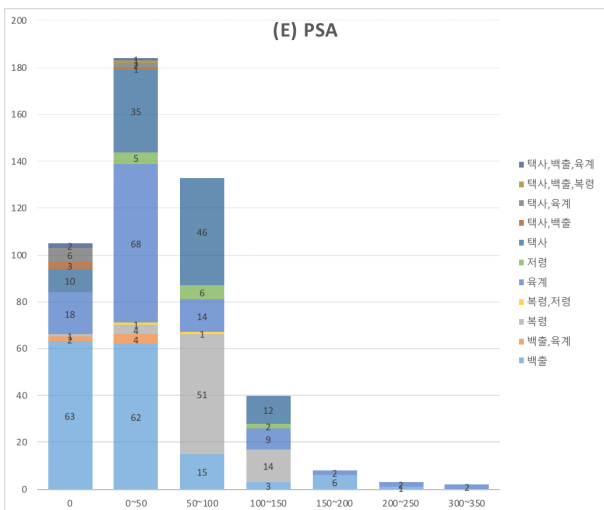
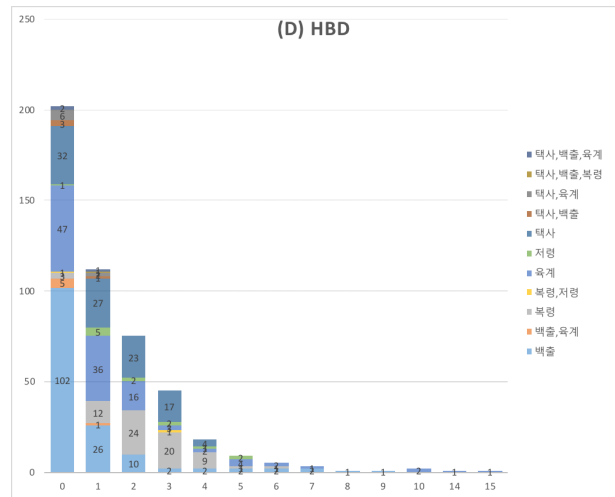
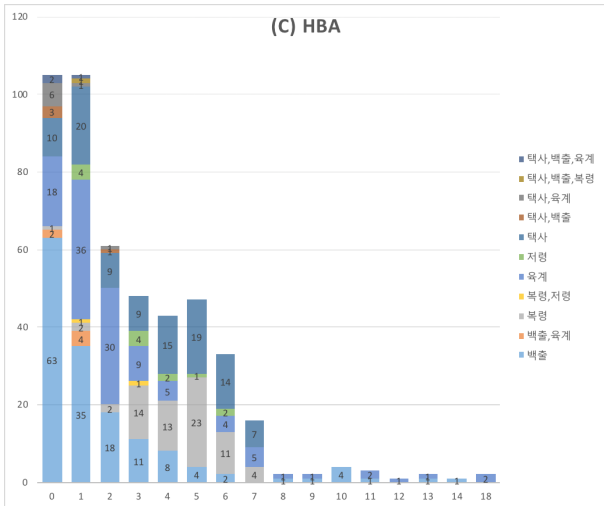
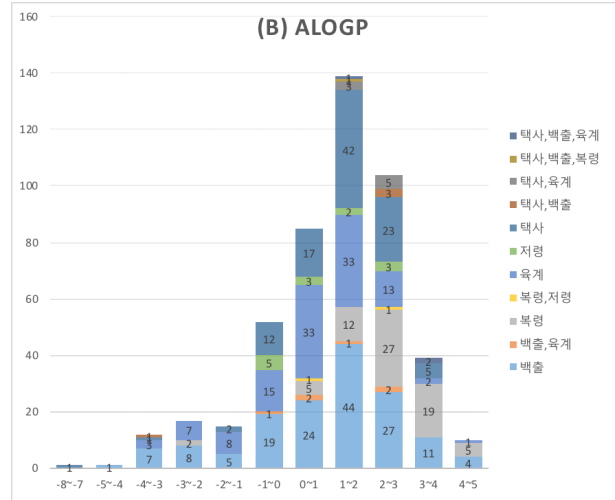
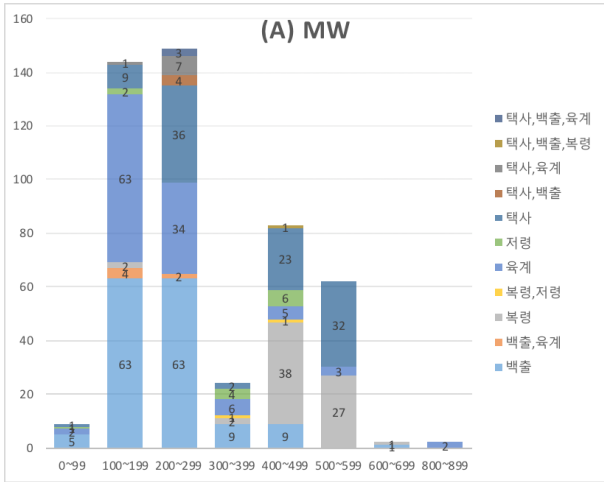
| Name | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA    | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|------|--|--------|--------|-----|-----|--------|------|------|-------|-------|------|
| 육계   | epicatechin  | 290.08 | -0.936 | 6   | 5   | 110.38 | 1    | 2    | 1     | 0.434 | TRUE |
| 백출   | 4-nonene, 2,3,3-trimethyl-, (Z)-   | 168.19 | 1.686  | 0   | 0   | 0      | 5    | 0    | 2     | 0.433 | TRUE |
| 복령   | poricoic acid B  | 484.32 | 3.825  | 5   | 3   | 94.83  | 9    | 0    | 1     | 0.433 | TRUE |
| 복령   | poricotriol A  | 470.38 | 2.259  | 3   | 3   | 60.69  | 10   | 0    | 1     | 0.43  | TRUE |
| 택사   | alisol A   | 490.37 | 0.875  | 5   | 4   | 97.99  | 5    | 0    | 1     | 0.429 | TRUE |
| 백출   | decane, 4-methyl-  | 156.19 | -0.693 | 0   | 0   | 0      | 7    | 0    | 1     | 0.428 | TRUE |
| 저령   | oxalic acid  | 90     | -0.48  | 4   | 2   | 74.6   | 1    | 0    | 1     | 0.426 | TRUE |
| 저령   | 5 $\alpha$ ,8 $\alpha$ -epidioxy-(22E,24R)-ergosta-6,22-dien-3 $\beta$ -ol | 428.33 | 2.829  | 3   | 1   | 38.69  | 4    | 0    | 3     | 0.425 | TRUE |
| 택사   | 2-butyl-2,7-octadien-1-ol  | 182.17 | 0.292  | 1   | 1   | 20.23  | 8    | 0    | 2     | 0.422 | TRUE |
| 백출   | decane, 2-methyl-  | 156.19 | -0.848 | 0   | 0   | 0      | 7    | 0    | 1     | 0.421 | TRUE |
| 저령   | 3,4-dihydroxybenzaldehyde  | 138.03 | -0.111 | 3   | 2   | 57.53  | 1    | 1    | 2     | 0.42  | TRUE |
| 복령   | 3-oxo-16 $\alpha$ ,25-dihydroxylanosta-7,9(11),24(31)-trien-21-oic acid    | 500.35 | 1.888  | 5   | 4   | 97.99  | 6    | 0    | 1     | 0.418 | TRUE |
| 백출   | naphthalene, decahydro-, trans-  | 138.14 | -0.742 | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 0     | 0.413 | TRUE |
| 육계   | ocimene  | 136.13 | 3.24   | 0   | 0   | 0      | 3    | 0    | 2     | 0.412 | TRUE |
| 백출   | 8- $\beta$ -methoxy atractylenolide I                                      | 262.16 | 1.469  | 3   | 0   | 35.53  | 1    | 0    | 3     | 0.408 | TRUE |
| 택사   | 1,2-dimethyl-cyclohexene   | 110.11 | 0.909  | 0   | 0   | 0      | 0    | 0    | 1     | 0.406 | TRUE |
| 백출   | decane, 3-methyl-  | 156.19 | -1.236 | 0   | 0   | 0      | 7    | 0    | 1     | 0.405 | TRUE |
| 택사   | 13,17-epoxy-alisol A   | 506.36 | 0.461  | 6   | 4   | 110.52 | 5    | 0    | 1     | 0.404 | TRUE |
| 백출   | luteolin   | 286.05 | -0.787 | 6   | 4   | 107.22 | 1    | 2    | 2     | 0.404 | TRUE |
| 백출   | undecane, 2-methyl-  | 170.2  | -1.136 | 0   | 0   | 0      | 8    | 0    | 1     | 0.404 | TRUE |
| 육계   | coumarin   | 146.04 | 1.031  | 2   | 0   | 26.3   | 0    | 1    | 2     | 0.403 | TRUE |
| 복령   | poricoic acid A  | 498.33 | 3.161  | 5   | 3   | 94.83  | 10   | 0    | 1     | 0.403 | TRUE |
| 백출   | propanoic acid, 2-hydroxy-, ethyl ester                                    | 118.06 | -0.442 | 3   | 1   | 46.53  | 4    | 0    | 2     | 0.402 | TRUE |
| 복령   | 25-hydroxyporicoic acid C  | 498.33 | 3.488  | 5   | 3   | 94.83  | 10   | 0    | 1     | 0.401 | TRUE |
| 백출   | atractylenolide III  | 248.14 | 1.061  | 3   | 1   | 46.53  | 0    | 0    | 3     | 0.396 | TRUE |
| 복령   | 29-hydroxydehydrotumulosic acid  | 500.35 | 1.237  | 5   | 4   | 97.99  | 7    | 0    | 1     | 0.395 | TRUE |
| 택사   | 2-decanone   | 156.15 | -1.896 | 1   | 0   | 17.07  | 7    | 0    | 1     | 0.394 | TRUE |
| 육계   | 2-ethyl-2-hexenal  | 126.1  | 0.406  | 1   | 0   | 17.07  | 4    | 0    | 2     | 0.393 | TRUE |
| 백출   | 3,5-octadien-2-one, (E,E)-   | 124.09 | 0.338  | 1   | 0   | 17.07  | 3    | 0    | 2     | 0.391 | TRUE |
| 백출   | diacetylactrylodiol  | 288.14 | 2.322  | 4   | 0   | 52.6   | 8    | 0    | 3     | 0.391 | TRUE |
| 백출   | 1(3H)-isobenzofuranone   | 134.04 | 0.933  | 2   | 0   | 26.3   | 0    | 1    | 2     | 0.389 | TRUE |
| 택사   | 16-oxo-11-anhydro-alisol A 24-acetate                                      | 528.35 | 1.946  | 6   | 2   | 100.9  | 7    | 0    | 2     | 0.387 | TRUE |
| 택사   | alismanol C  | 528.35 | 1.946  | 6   | 2   | 100.9  | 7    | 0    | 2     | 0.387 | TRUE |
| 백출   | pyrene   | 202.08 | 2.569  | 0   | 0   | 0      | 0    | 4    | 1     | 0.384 | TRUE |
| 육계   | 3-phenylpropanol acetate   | 178.1  | 0.913  | 2   | 0   | 26.3   | 5    | 1    | 3     | 0.38  | TRUE |
| 택사   | cyclohexanone  | 98.07  | -1.058 | 1   | 0   | 17.07  | 0    | 0    | 0     | 0.377 | TRUE |
| 백출   | (6E,12E)-tetradeca-6,12-diene-8,10-diene-1,3-diol diacetate                | 302.15 | 2.034  | 4   | 0   | 52.6   | 9    | 0    | 3     | 0.371 | TRUE |
| 복령   | oleanic acid 3-O-acetate (3-O-acetyloleanolic acid)                        | 498.37 | 2.509  | 4   | 1   | 63.6   | 3    | 0    | 3     | 0.369 | TRUE |
| 저령   | polyporusterone A  | 478.33 | -0.338 | 6   | 5   | 118.22 | 5    | 0    | 0     | 0.369 | TRUE |
| 백출   | 2-hexenal, (E)-  | 98.07  | 0.188  | 1   | 0   | 17.07  | 3    | 0    | 2     | 0.363 | TRUE |
| 백출   | atractylenolide II   | 232.15 | 1.451  | 2   | 0   | 26.3   | 0    | 0    | 3     | 0.359 | TRUE |

| Name  | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA    | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB   |
|-------|--|--------|--------|-----|-----|--------|------|------|-------|-------|------|
| 육계    | 2,3-octanedione  | 142.1  | -1.296 | 2   | 0   | 34.14  | 5    | 0    | 2     | 0.353 | TRUE |
| 저령    | polyporusterone B  | 476.31 | -0.152 | 6   | 5   | 118.22 | 5    | 0    | 1     | 0.353 | TRUE |
| 육계    | cinnzeylanone  | 382.2  | -2.076 | 7   | 5   | 127.45 | 1    | 0    | 0     | 0.352 | TRUE |
| 육계    | citral   | 152.12 | 2.489  | 1   | 0   | 17.07  | 4    | 0    | 3     | 0.343 | TRUE |
| 백출    | biatractylolide  | 462.28 | 2.95   | 4   | 0   | 52.6   | 1    | 0    | 3     | 0.342 | TRUE |
| 복령    | poricoic acid ZA   | 502.33 | 2.326  | 6   | 4   | 115.06 | 10   | 0    | 1     | 0.341 | TRUE |
| 복령    | poricoic acid ZG   | 502.33 | 2.115  | 6   | 4   | 115.06 | 10   | 0    | 1     | 0.341 | TRUE |
| 백출    | undecane   | 156.19 | -2.489 | 0   | 0   | 0      | 8    | 0    | 1     | 0.341 | TRUE |
| 택사    | dibutyl phthalate  | 278.15 | -0.196 | 4   | 0   | 52.6   | 10   | 1    | 3     | 0.338 | TRUE |
| 육계    | anhydrocinnzeylanine   | 408.21 | -0.179 | 7   | 3   | 113.29 | 3    | 0    | 3     | 0.337 | TRUE |
| 복령    | poricoic acid D  | 514.33 | 2.722  | 6   | 4   | 115.06 | 10   | 0    | 1     | 0.334 | TRUE |
| 복령    | 25-hydroxyporicoic acid H  | 516.35 | 2.313  | 6   | 4   | 115.06 | 10   | 0    | 1     | 0.332 | TRUE |
| 백출    | esculetin  | 178.03 | -0.095 | 4   | 2   | 66.76  | 0    | 1    | 3     | 0.331 | TRUE |
| 육계    | methylstictic acid   | 400.08 | 0.067  | 9   | 1   | 117.59 | 3    | 2    | 4     | 0.331 | TRUE |
| 복령    | 3 $\beta$ -acetoxy-16 $\alpha$ -hydroxy-lanosta-8,24(31)-diene-21-oic acid   | 498.37 | 3.729  | 4   | 1   | 63.6   | 7    | 0    | 3     | 0.33  | TRUE |
| 백출,육계 | hexanal  | 100.09 | -0.97  | 1   | 0   | 17.07  | 4    | 0    | 2     | 0.328 | TRUE |
| 육계    | pentanal   | 86.07  | -0.682 | 1   | 0   | 17.07  | 3    | 0    | 2     | 0.328 | TRUE |
| 택사    | alismanol E  | 530.36 | 1.447  | 6   | 2   | 93.06  | 3    | 0    | 3     | 0.326 | TRUE |
| 백출    | cyclobis(anthracene-9,10-dimethylene)  | 408.19 | 4.452  | 0   | 0   | 0      | 0    | 6    | 1     | 0.326 | TRUE |
| 택사    | alisol F 24-acetate  | 530.36 | 1.447  | 6   | 2   | 93.06  | 4    | 0    | 3     | 0.325 | TRUE |
| 택사    | 16-oxo-11-acetate-alisol A   | 546.36 | 0.9    | 7   | 3   | 121.13 | 7    | 0    | 2     | 0.321 | TRUE |
| 택사    | 16-oxo-alisol A 23-acetate   | 546.36 | 0.9    | 7   | 3   | 121.13 | 7    | 0    | 2     | 0.321 | TRUE |
| 택사    | 16-oxo-alisol A 24-acetate   | 546.36 | 0.9    | 7   | 3   | 121.13 | 7    | 0    | 2     | 0.321 | TRUE |
| 택사    | alisol C 23-acetate  | 528.35 | 1.667  | 6   | 1   | 93.2   | 6    | 0    | 3     | 0.321 | TRUE |
| 백출    | dihydrosyrindine   | 374.16 | -3.118 | 9   | 5   | 138.07 | 8    | 1    | 0     | 0.32  | TRUE |
| 택사    | alisol D   | 530.36 | 1.606  | 6   | 1   | 88.66  | 6    | 0    | 3     | 0.319 | TRUE |
| 백출    | tridecane  | 184.22 | -3.065 | 0   | 0   | 0      | 10   | 0    | 1     | 0.316 | TRUE |
| 택사    | alisol L 23-acetate  | 510.33 | 2.712  | 5   | 0   | 72.97  | 6    | 0    | 3     | 0.312 | TRUE |
| 택사    | 11-deoxy-alisol C 23-acetate   | 512.35 | 2.433  | 5   | 0   | 72.97  | 6    | 0    | 3     | 0.311 | TRUE |
| 복령    | 3-O-acetyl-16 $\alpha$ -hydroxydehydrotrametenolic acid                      | 512.35 | 3.371  | 5   | 2   | 83.83  | 7    | 0    | 3     | 0.311 | TRUE |
| 복령    | 3 $\beta$ -hydroxy-16 $\alpha$ -acetoxy-lanosta-7,9(11),24-trien-21-oic acid | 512.35 | 3.371  | 5   | 2   | 83.83  | 7    | 0    | 3     | 0.311 | TRUE |
| 택사    | 11-deoxy-13,17-epoxy-alisol B 23-acetate                                     | 514.37 | 2.373  | 5   | 0   | 68.43  | 6    | 0    | 3     | 0.31  | TRUE |
| 택사    | 25-anhydro-alisol A 11-acetate   | 514.37 | 2.274  | 5   | 2   | 83.83  | 7    | 0    | 3     | 0.31  | TRUE |
| 택사    | 25-anhydro-alisol A 24-acetate   | 514.37 | 2.274  | 5   | 2   | 83.83  | 7    | 0    | 3     | 0.31  | TRUE |
| 복령    | 3-O-acetyl-16 $\alpha$ -hydroxytrametenolic acid                             | 514.37 | 2.962  | 5   | 2   | 83.83  | 7    | 0    | 3     | 0.31  | TRUE |
| 복령    | ribitol  | 152.07 | -2.429 | 5   | 5   | 101.15 | 4    | 0    | 0     | 0.308 | TRUE |
| 백출    | nonanal  | 142.14 | -1.834 | 1   | 0   | 17.07  | 7    | 0    | 2     | 0.302 | TRUE |
| 백출    | 1-isovaleryl-4E-6E6E/Z-12E-atractylentriol                                   | 316.17 | 1.865  | 4   | 2   | 66.76  | 9    | 0    | 4     | 0.295 | TRUE |
| 육계    | cinnzeylanol   | 384.21 | -2.484 | 7   | 6   | 130.61 | 1    | 0    | 0     | 0.295 | TRUE |
| 택사    | alisol M 23-acetate  | 544.34 | 1.094  | 7   | 2   | 113.43 | 6    | 0    | 3     | 0.293 | TRUE |

| Name | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA    | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB    |
|------|--|--------|--------|-----|-----|--------|------|------|-------|-------|-------|
| 백출   | 1- $\alpha$ -methylbutyryl-4E-6E/Z-12E-atractylentriol | 316.17 | 1.315  | 4   | 2   | 66.76  | 9    | 0    | 4     | 0.291 | TRUE  |
| 육계   | decanal  | 156.15 | -2.122 | 1   | 0   | 17.07  | 8    | 0    | 2     | 0.29  | TRUE  |
| 복령   | dehydropachymic acid                                   | 526.37 | 2.706  | 5   | 2   | 83.83  | 8    | 0    | 3     | 0.289 | TRUE  |
| 복령   | 5 $\alpha$ ,8 $\alpha$ -peroxydehydrotumulosic acid    | 514.33 | 2.855  | 6   | 3   | 96.22  | 6    | 0    | 3     | 0.287 | TRUE  |
| 복령   | pachymic acid  | 528.38 | 2.298  | 5   | 2   | 83.83  | 8    | 0    | 3     | 0.287 | TRUE  |
| 백출   | (Z)-2-heptenal   | 112.09 | -0.1   | 1   | 0   | 17.07  | 4    | 0    | 3     | 0.282 | TRUE  |
| 육계   | anhydrocinnzeylanol                                    | 366.2  | -0.558 | 6   | 4   | 107.22 | 1    | 0    | 3     | 0.282 | TRUE  |
| 백출   | acetic acid, butyl ester                               | 116.08 | -0.594 | 2   | 0   | 26.3   | 4    | 0    | 3     | 0.278 | TRUE  |
| 복령   | pachymic acid methyl ester                             | 542.4  | 2.549  | 5   | 1   | 72.83  | 9    | 0    | 3     | 0.276 | TRUE  |
| 백출   | atractylenolide I                                      | 230.13 | 1.46   | 2   | 0   | 26.3   | 0    | 0    | 4     | 0.272 | TRUE  |
| 복령   | poricoic acid GM                                       | 500.35 | 3.668  | 5   | 2   | 83.83  | 10   | 0    | 3     | 0.272 | TRUE  |
| 육계   | 2-nonenal  | 140.12 | -0.676 | 1   | 0   | 17.07  | 6    | 0    | 3     | 0.271 | TRUE  |
| 백출   | eudesma-5,11(13)-dien-8,12-olide                       | 232.15 | 1.106  | 2   | 0   | 26.3   | 0    | 0    | 4     | 0.27  | TRUE  |
| 복령   | mannitol   | 182.08 | -2.94  | 6   | 6   | 121.38 | 5    | 0    | 0     | 0.27  | TRUE  |
| 복령   | poricoic acid BM                                       | 498.33 | 4.076  | 5   | 2   | 83.83  | 10   | 0    | 3     | 0.27  | TRUE  |
| 백출   | trans-2-decenal  | 154.14 | -0.964 | 1   | 0   | 17.07  | 7    | 0    | 3     | 0.262 | TRUE  |
| 복령   | 6 $\alpha$ -hydroxydehydropachymic acid                | 500.31 | 0.894  | 6   | 3   | 104.06 | 8    | 0    | 3     | 0.26  | TRUE  |
| 택사   | alismaketone-C 23-acetate                              | 528.35 | 2.489  | 6   | 0   | 90.04  | 9    | 0    | 3     | 0.26  | TRUE  |
| 택사   | alisol A 23-acetate                                    | 532.38 | 1.254  | 6   | 3   | 104.06 | 7    | 0    | 3     | 0.259 | TRUE  |
| 택사   | alisol A 24-acetate                                    | 532.38 | 1.254  | 6   | 3   | 104.06 | 7    | 0    | 3     | 0.259 | TRUE  |
| 육계   | cinnzeylanine  | 426.23 | -2.105 | 8   | 5   | 136.68 | 3    | 0    | 2     | 0.256 | TRUE  |
| 택사   | alisol B 23-acetate                                    | 514.37 | 2.021  | 5   | 1   | 76.13  | 6    | 0    | 4     | 0.254 | TRUE  |
| 백출   | 2-undecenal  | 168.15 | -1.252 | 1   | 0   | 17.07  | 8    | 0    | 3     | 0.251 | TRUE  |
| 복령   | 29-hydroxydehydropachymic acid                         | 528.35 | 1.583  | 6   | 3   | 104.06 | 8    | 0    | 3     | 0.251 | TRUE  |
| 택사   | alisol D acetate                                       | 572.37 | 1.986  | 7   | 0   | 94.73  | 8    | 0    | 3     | 0.25  | TRUE  |
| 복령   | 16-O-acetylpachymic acid                               | 570.39 | 2.677  | 6   | 1   | 89.9   | 10   | 0    | 3     | 0.247 | TRUE  |
| 택사   | 11-deoxy-alisol B 23-acetate                           | 498.37 | 2.787  | 4   | 0   | 55.9   | 6    | 0    | 4     | 0.245 | TRUE  |
| 택사   | 13,17-epoxy-alisol A 23-acetate                        | 548.37 | 0.84   | 7   | 3   | 116.59 | 7    | 0    | 3     | 0.245 | TRUE  |
| 택사   | 13,17-epoxy-alisol A 24-acetate                        | 548.37 | 0.84   | 7   | 3   | 116.59 | 7    | 0    | 3     | 0.245 | TRUE  |
| 복령   | 25-hydroxypachymic acid                                | 544.38 | 1.859  | 6   | 3   | 104.06 | 8    | 0    | 3     | 0.245 | TRUE  |
| 택사   | 16 $\beta$ -hydroxy-alisol B 23-acetate                | 530.36 | 1.447  | 6   | 2   | 96.36  | 6    | 0    | 4     | 0.234 | TRUE  |
| 택사   | alisol N 23-acetate                                    | 530.36 | 1.447  | 6   | 2   | 96.36  | 6    | 0    | 4     | 0.234 | TRUE  |
| 택사   | 16 $\beta$ -methoxy-alisol B 23-acetate                | 544.38 | 1.856  | 6   | 1   | 85.36  | 7    | 0    | 4     | 0.228 | TRUE  |
| 백출   | 2,4-decadienal   | 152.12 | 0.079  | 1   | 0   | 17.07  | 6    | 0    | 4     | 0.228 | TRUE  |
| 육계   | cinncasinol A  | 382.2  | -1.446 | 7   | 5   | 127.45 | 2    | 0    | 3     | 0.225 | TRUE  |
| 택사   | allyl hexanoate  | 156.12 | -0.15  | 2   | 0   | 26.3   | 7    | 0    | 4     | 0.222 | TRUE  |
| 백출   | 1-acetyl-3-senecioid-4E-6E/Z-12E-atractylentriol       | 356.16 | 3.086  | 5   | 1   | 72.83  | 10   | 0    | 5     | 0.214 | TRUE  |
| 백출   | L-arginine, N2-[(phenylmethoxy)carbonyl]-              | 308.15 | -0.52  | 8   | 4   | 140.03 | 10   | 1    | 4     | 0.196 | TRUE  |
| 복령   | 3 $\beta$ -p-hydroxybenzoyldehydrotumulosic acid       | 620.37 | 2.768  | 7   | 4   | 124.29 | 9    | 1    | 3     | 0.19  | TRUE  |
| 백출   | pristane   | 268.31 | 2.082  | 0   | 0   | 0      | 12   | 0    | 0     | 0.508 | FALSE |
| 복령   | poricoic acid ZF                                       | 454.34 | 0.185  | 3   | 1   | 54.37  | 11   | 1    | 1     | 0.486 | FALSE |
| 육계   | pentadecanoic acid                                     | 242.22 | -3.61  | 2   | 1   | 37.3   | 13   | 0    | 1     | 0.339 | FALSE |

| Name   | Compound  | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA    | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB    |
|--------|---|--------|--------|-----|-----|--------|------|------|-------|-------|-------|
| 백출     | linoleic acid   | 280.24 | -0.948 | 2   | 1   | 37.3   | 14   | 0    | 2     | 0.329 | FALSE |
| 텍사, 백출 | palmitic acid   | 256.24 | -3.898 | 2   | 1   | 37.3   | 14   | 0    | 1     | 0.323 | FALSE |
| 육계     | 7-tetradecen-1-ol   | 212.21 | -1.722 | 1   | 1   | 20.23  | 11   | 0    | 2     | 0.319 | FALSE |
| 백출     | 4H-1-benzopyran-4-one,<br>6-( $\beta$ -D-glucopyranosyloxy)-5-hydroxy-<br>7-methoxy-2-phenyl                        | 446.12 | -2.251 | 10  | 5   | 155.14 | 5    | 2    | 1     | 0.318 | FALSE |
| 복령     | poricoic acid F   | 514.33 | 2.07   | 6   | 4   | 115.06 | 11   | 0    | 1     | 0.314 | FALSE |
| 육계     | 9-hexadecenoic acid   | 254.22 | -1.767 | 2   | 1   | 37.3   | 13   | 0    | 2     | 0.312 | FALSE |
| 백출     | hexadecane  | 226.27 | -3.929 | 0   | 0   | 0      | 13   | 0    | 1     | 0.281 | FALSE |
| 백출     | icariside D1  | 416.17 | -2.141 | 10  | 6   | 158.3  | 8    | 1    | 0     | 0.276 | FALSE |
| 텍사     | 2-ethylhexyl phthalate  | 390.28 | -0.771 | 4   | 0   | 52.6   | 16   | 1    | 2     | 0.275 | FALSE |
| 백출     | heptadecane   | 240.28 | -4.217 | 0   | 0   | 0      | 14   | 0    | 1     | 0.27  | FALSE |
| 백출     | oleic acid  | 282.26 | -2.343 | 2   | 1   | 37.3   | 15   | 0    | 2     | 0.27  | FALSE |
| 복령     | poricoic acid CM  | 496.36 | 4.178  | 4   | 1   | 63.6   | 11   | 0    | 3     | 0.265 | FALSE |
| 백출     | 1-acetyl-3- $\alpha$ -methylbutyryl-4E-6E/Z-1<br>2E-atractylentriol   | 358.18 | 1.694  | 5   | 1   | 72.83  | 11   | 0    | 4     | 0.263 | FALSE |
| 백출     | 14-acetoxy-12- $\beta$ -methylbutyl-2E,8E,10<br>E-trien-4,6-diyne-1-ol  | 358.18 | 1.694  | 5   | 1   | 72.83  | 11   | 0    | 4     | 0.263 | FALSE |
| 복령     | poricoic acid AM  | 512.35 | 3.412  | 5   | 2   | 83.83  | 11   | 0    | 3     | 0.252 | FALSE |
| 복령     | poricoic acid HM  | 514.37 | 3.003  | 5   | 2   | 83.83  | 11   | 0    | 3     | 0.252 | FALSE |
| 복령     | poricoic acid CE  | 510.37 | 4.428  | 4   | 1   | 63.6   | 12   | 0    | 3     | 0.24  | FALSE |
| 백출     | 9-octadecene, (E)-  | 252.28 | -2.374 | 0   | 0   | 0      | 14   | 0    | 2     | 0.239 | FALSE |
| 백출     | pentadecanal  | 226.23 | -3.562 | 1   | 0   | 17.07  | 13   | 0    | 2     | 0.235 | FALSE |
| 복령     | poricoic acid AE  | 526.37 | 3.662  | 5   | 2   | 83.83  | 12   | 0    | 3     | 0.231 | FALSE |
| 백출     | 3-octadecene, (E)-  | 252.28 | -2.918 | 0   | 0   | 0      | 14   | 0    | 2     | 0.23  | FALSE |
| 육계     | cardene   | 479.21 | 2.875  | 6   | 1   | 119.68 | 11   | 2    | 4     | 0.229 | FALSE |
| 백출     | atractyloside A   | 448.23 | -3.686 | 10  | 7   | 177.14 | 5    | 0    | 0     | 0.222 | FALSE |
| 복령     | 31-hydroxyl-16-O-acetylpachymic acid  | 588.4  | 1.603  | 7   | 2   | 110.13 | 11   | 0    | 3     | 0.215 | FALSE |
| 백출     | atractyloside B   | 450.25 | -3.712 | 10  | 8   | 180.3  | 5    | 0    | 0     | 0.208 | FALSE |
| 텍사     | (Z)-7-dodeceny acetate  | 226.19 | -0.767 | 2   | 0   | 26.3   | 11   | 0    | 4     | 0.2   | FALSE |
| 육계     | quercitrin  | 448.1  | -2.835 | 11  | 7   | 186.37 | 3    | 2    | 2     | 0.19  | FALSE |
| 백출     | (2E)-decene-4,6-diyne-1,8-diol<br>8-O- $\beta$ -D-apiofuranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- $\beta$ -D-gl<br>ucopyranoside | 458.18 | -2.703 | 11  | 7   | 178.53 | 8    | 0    | 1     | 0.188 | FALSE |
| 백출     | scopoletin- $\beta$ -D-xylopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- $\beta$ -<br>D-glucopyranoside                            | 486.14 | -3.358 | 13  | 6   | 193.83 | 6    | 1    | 2     | 0.173 | FALSE |
| 복령     | 26-hydroxyporicoic acid DM  | 544.34 | 2.084  | 7   | 4   | 124.29 | 12   | 0    | 3     | 0.169 | FALSE |
| 텍사     | ethyl palmitate   | 284.27 | -3.396 | 2   | 0   | 26.3   | 16   | 0    | 3     | 0.168 | FALSE |
| 텍사     | ethyl linolate  | 308.27 | -0.447 | 2   | 0   | 26.3   | 16   | 0    | 4     | 0.167 | FALSE |
| 육계     | cinnacasside A  | 512.23 | -1.64  | 11  | 6   | 175.37 | 9    | 1    | 2     | 0.165 | FALSE |
| 백출     | oxalic acid, allyl nonyl ester  | 256.17 | -1.416 | 4   | 0   | 52.6   | 13   | 0    | 5     | 0.133 | FALSE |
| 육계     | procyanidin B2  | 578.14 | -2.262 | 12  | 10  | 220.76 | 3    | 4    | 1     | 0.117 | FALSE |
| 육계     | procyanidin   | 594.14 | -2.069 | 13  | 10  | 229.99 | 4    | 4    | 1     | 0.115 | FALSE |
| 육계     | cinnamtannin B1   | 864.19 | -3.554 | 18  | 14  | 320.14 | 4    | 6    | 1     | 0.076 | FALSE |
| 육계     | procyanidin C1  | 866.21 | -3.587 | 18  | 15  | 331.14 | 5    | 6    | 1     | 0.075 | FALSE |
| 텍사     | hexadecanoic acid,<br>2-hydroxy-1,3-propanediyl ester   | 568.51 | -7.986 | 5   | 1   | 72.83  | 34   | 0    | 3     | 0.047 | FALSE |

| Name | Compound   | MW     | ALOGP  | HBA | HBD | PSA   | ROTB | AROM | ALERT | QED   | OB    |
|------|--|--------|--------|-----|-----|-------|------|------|-------|-------|-------|
| 백출   | 2-propenoic acid,<br>3-(3,4-dihydroxyphenyl)-4-(6-β-D-glucopyranosyl-5,7-dihydroxy-4-oxo-4H-1-benzopyran-2-yl)-2-hydroxyphenyl | 610.13 | -2.751 | 14  | 9   | 243.9 | 7    | 3    | 5     | 0.043 | FALSE |







## 2. 오령산 구성 성분 분석

Fig. 2는 Table 1에서 보인 성분들의 물리화학적 프로퍼티와 QED, OB 값들의 분포를 누적 차트로 그린 것이다.

MW는 200에서 300사이의 값을 가지는 성분이 149개로 가장 많이 가지는 것으로 나왔다. 하지만, 복령은 poricoic acid, 텍사는 alisol과 같은 triterpene 성분들이 많기 때문에 다른 약제들과 달리 400~600 g/mol의 MW 값을 가지는 성분들이 많았다. ALOGP는 1~2사이의 값이 139개로 가장 많았다. ALOGP는 일반적으로 성분이 타겟에 얼마나 영향을 미치는지와 관련이 있는데 Bickerton et al.의 연구에서는 2~3 사이의 성분들이 가장 많았고 1~2 사이의 성분들은 두 번째로 많았다. HBA는 0~1개, HBD는 0개인 성분들이 가장 많았는데, 오령산의 성분들이 decane과 같은 hydrocarbon이나  $\beta$ -elemene과 같은 terpene이 많아서 원자들간의 정전기적 특징이 적은 성분들을 많기 때문이다. PSA는 0~50 angstrom 사이의 값을 가지는 성분이 184개로 가장 많았다. Veber et al.의 논문에서는 PSA가 140을 넘으면 세포벽을 침투하기 어렵기 때문에 약물로서의 능력이 떨어진다고 보는데, 140 이하인 성분은 461개로 대부분의 성분들이 이 조건을 만족하는 것으로 나왔다. ROTB는 일반적으로 ROTB의 개수가 증가하면 약물의 흡수율이 좋지 않다고 알려져 있다. 오령산 성분들은 ROTB가 1개인 성분들이 100개로 가장 많았으며, 10개 이하인 것들이 445개로 대부분이 Veber의 규칙을 만족하였다. 특히, 복령의 경우 poricoic acid들은 ROTB 개수가 많아서 Veber의 규칙에 맞지 않는 성분들이 많았다. AROM은 1개나 2개일 때 QED값이 높게 나오는데 1개나 2개보다는 0개인 성분이 366개로 대부분을 차지하였다. ALERT는 작을수록 QED값이 높게 나오는데 1개인 성분들이 223개로 가장 많았다.

QED는 0.5~0.6 사이의 값이 133개로 가장 많았다. 대부분의 성분들은 0.2에서 0.7사이의 값을 가지고 있었으며, 이는 442개로 전체의 93%가 넘는 개수이다. OB는 TRUE인 것이 432개였으며, FALSE인 것은 43개로 90% 이상이 TRUE의 값을 가졌다.

한국<sup>18)</sup>과 중국<sup>19)</sup> 약전에 육계의 지표 성분이라고 기재된 cinnamic acid는 0.64, cinnamaldehyde는 0.44의 QED 값을 보였으며, 저령의 성분으로 기재된 ergosterol은 0.72, 텍사의 성분이라고 기재된 alisol B 23-acetate는 0.25였지만 alisol B는 0.48의 QED 값을 보였다. 백출의 주요성분으로 알려져 있는 atractylon<sup>20)</sup>은 0.59의 QED 값을 가졌다. 복령의 poricoic acid는 seco-lanostane type이나 seco-eburicane type의 terpene들을 가지는데 두 타입 모두 OB가 false이거나 OB가 true이어서 QED가 0.2~0.5 사이의 대체로 낮은 값을 가지고 있었다.

마지막으로 QED 구간별 OB분포를 통해서 QED와 OB 두 개의 상관관계를 보면 대부분 OB가 FALSE인 성분들은 QED 값이 낮은 경향을 보였으며, QED 값이 높은 것들은 OB가 TRUE의 값을 가지고 있었다.

본 연구에서는 오령산 구성성분들에 대한 물리화학적 프로퍼티들을 계산하고 이를 이용해서 DL과 OB 값을 구했다. 물리화학적 프로퍼티를 구하기 전에는 SMILES 문자열을 이용해서 화합물의 중복제거를 하였다. 사실 화합물은 화학구조가 유일한 식별키가 되며, InChI (International Chemical Identifier)나 CAS(Cheical Abstracts Service) registry number를 이용해 서로 다른 화학 구조에 대한 식별 문자열을 제공한다. 특히, 어떤 화합물의 stereoisomer들은 엄밀히 말해서 서로 다른 화합물이기 때문에 서로 다른 InChI 문자열을 가지지만, 일반적으로 물리화학적 프로퍼티 값들은 동일하며 그렇기 때문에 동일한 QED와 OB값을 가지게 된다. 따라서 본 연구에서는 화합물의 여러 stereoisomer들에 대해서 물리화학적 프로퍼티를 모두 계산하지 않고 하나의 화합물만 계산하였다. 이와 같이 stereoisomer들 간에 중복을 제거하기 위해서 본 연구에서는 stereoisomer들에서는 동일한 문자열을 제공하는 SMILES를 이용하였다. 또한, STITCH<sup>21)</sup>나 BindingDB<sup>22)</sup>와 같은 타겟 네트워크 데이터베이스들도 화합물 입력으로 SMILES 문자열을 받아서 연관된 타겟을 검색해 준다. 따라서, 향후에 오령산 성분의 연관 타겟을 검색할 때도 이용할 수 있다.

DL은 어떤 성분이 상용 약물들과 얼마나 비슷한지를 예측하는 것으로, drug discovery의 초기단계에서 유효 성분들을 선택하는데 중요한 자료로 이용된다. DL을 측정하기 위해서 그 동안 수많은 연구가 이루어져 왔는데, 최근에는 성분의 물리화학적 프로퍼티들을 가지고 DL을 계산한 QED 방법이 많이 이용되고 있다. 다른 연구들은 DL을 계산하기 위해 대부분 머신 러닝 방법을 이용하기 때문에 성분들과 DL 결과 값들 간에 어떤 관계가 있는지 직관적이고 명료하게 분석하는데 어려움이 있지만 QED 방법에서는 쉽게 파악할 수 있는 장점이 있다.

본 연구에서도 QED 방법을 이용해서 오령산의 구성성분들에 대해 DL을 계산하였다. DL은 성분들이 약물과 얼마나 유사한지를 예측한 값이기 때문에 어떤 값 이상이면 약물로서 효능이 있다 없음을 판별하는 것보다는 단지 값이 낮으면 약물로서 작용할 수 있는지 의심해 볼 수 있고, 값이 높으면 약물의 효능을 자세하게 탐색해 보는데 참고 자료로 이용할 수 있다. 예를 들어, 중국 약전에는 alisol B 23-acetate가 지표 성분이라고 기재되어 있지만 본 연구의 분석에 따르면 alisol B 23-acetate보다 alisol B의 DL값이 높게 나왔다. 따라서, alisol B 23-acetate보다 alisol B가 약물로써 작용 효과가 높을 수 있다는 가정을 하거나, 대사과정에서 alisol B 23-acetate의 deacetylation이 있는지 탐색하고 연관해서 분석해 볼 수가 있다.

OB는 사실 DL과 명확히 구별되는 개념은 아니다. 하지만, DL을 분석한 다음에 약물의 흡수와 관련된 분자 프로퍼티들을 중심으로 성분들을 추가로 분석하는데 이용된다. OB는 Lipinski나 Veber의 방법과 같이 규칙들을 기반으로 계산하거나 기계 학습 방법을 이용한 방법들이 있다. 하지만 기계 학습 방법들은 Xu et al.의 논문에서 언급되었듯이 대부분 성능이 낮으며, Xu et al.의 모델은 데이터가 공개되지 않아 사용하기 어려운 문제가 있다. 대신, 본 연구에서는 Veber의 규칙 기반 방법을 이용하였다. Hou et al.의 논문에서는 사람 대상 실험 데이터에서 OB가 20%를 초과하는 성분들 중 84%가 Veber의 규칙을

## IV. 고 찰

만족하지만, 20% 미만인 성분들에 대해서는 false positive가 높다고 언급하였다. 따라서 OB가 20% 미만인 성분들에 대해서는 정확도가 많이 떨어진다고 볼 수 있다. 오령산 성분들은 Hou의 실험 데이터와 같이 기 계산된 OB 값이 알려져 있지 않기 때문에 20% 미만인 성분들이 어떤 것들이 있는지 알기 어렵지만, 향후 분석에 참고할 필요가 있다.

이렇게 분석된 오령산 성분들의 DL과 OB는 향후에 성분들의 타겟을 검색하고 타겟이 질병에 미치는 pathway를 분석하는데 있어 가중치를 부여하는데 활용할 계획이다. 시스템 약리학 분석에서는 성분, 타겟, 질병에 대한 네트워크가 그려지고 이를 기반으로 처방이 어떤 질병에 영향을 미치는지를 분석하게 되는데 단순히 어떤 성분이 어떤 질병과 연결만 되어 있다고 효능을 가진다고 하기는 어려우며, 이와 같은 DL과 OB과 같은 지표 데이터를 기반으로 연결 가중치를 계산하는데 활용할 수 있을 것이다.

## V. 결 론

오령산(五苓散)은 이수삼습(利水滲濕)하고 온양화기(溫陽化氣)하는 효능이 있어 수습(水濕)이나 담음(痰飲)의 정체로 나타나는 질환에 처방되어 왔다. 본 연구에서는 오령산의 작용 기전을 시스템 약리학적 방법으로 탐색해보기 위한 선행 연구로서, TM-MC 데이터베이스에서 오령산 구성약재의 성분들을 조사하였으며, 이 성분의 물리화학적 특성들을 분석해서 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. TM-MC에서 텍사는 126개, 백출은 174개, 복령은 84개, 저령은 18개, 육계는 142개의 총 544개 구성성분이 식별되었다. 또한 성분 구조식이 없는 것을 제외하고, SMILES 문자열 기준으로 중복 제거를 해서 총 475개의 구성 성분을 식별하였다.
2. 오령산 구성성분에 대한 물리화학적 프로퍼티를 분석한 결과, MW는 200~300 g/mol, ALOGP는 1~2, HBA는 0~1개, HBD는 0개, PSA는 0~50 angstrom, ROTB는 1개, AROM은 0개, ALERT는 1개인 성분들이 가장 많았다.
3. 한국과 중국 약전에 지표 성분으로 기재된 육계의 cinnamic acid와 cinnamaldehyde는 0.64와 0.44, 저령의 ergosterol은 0.72, 텍사의 alisol B 23-acetate는 0.25의 QED 값을 가졌다. 또한 이 성분들 모두 OB는 TRUE의 값을 가졌다.
4. QED는 전체 성분들 중에 93%의 성분들이 0.2에서 0.7 사이의 값을 가지고 있었으며, OB는 90%의 성분들이 TRUE의 값을 가졌다. OB가 FALSE인 성분들은 QED 값이 낮은 경향을 보였으며, QED 값이 높은 것들은 OB가 TRUE의 값을 가지고 있었다.

본 연구에서는 DL과 OB의 인실리코 방법으로 많이 사용하는

QED와 Veber의 규칙을 이용해서 오령산의 유효 성분 후보들을 스크리닝 하였다. 향후에는 시스템 약리학 방법을 이용해서 성분들의 타겟을 분석하는데 이 결과를 이용할 계획이다.

## 감사의 글

이 논문은 한국연구재단의 신진연구지원사업(2015R1C1A1A01052309), 바이오의료기술개발사업(2015M3A9E3051024)과 한국한의학연구원 주요사업 “한의 PHR 활용기술 개발(K18093)”의 지원을 받아 수행되었습니다.

## References

1. 한의과대학 방제학교수 공편저. 방제학. 서울:영림사; 2003, pp. 504-6.
2. Lee YJ, Lee SM, Cui X, Yoon JJ, Oh HC, Kim YC, Park MC, Kang DG, Lee HS. Quantitative evaluation of Oryeongsan and its action on water regulation in renal inner medullary collecting duct cells. *Journal of Ethnopharmacology*. 2016 ; 185:310-8.
3. Zhao S, Iyengar R. Systems Pharmacology: Network Analysis to Identify Multiscale Mechanisms of Drug Action. *Annu Rev Pharmacol Toxicol*. 2012 ; 52:505-21.
4. Yao Y, Zhang X, Wang Z, Zheng C, Li P, Huang C, Tao W, Xiao W, Wang Y, Huang L, Yang L. Deciphering the combination principles of Traditional Chinese Medicine from a systems pharmacology perspective based on Ma-huang Decoction. *Journal of Ethnopharmacology*. 2013 ; 150(2):619-38.
5. Bickerton GR, Paolini GV, Besnard J, Muresan S, Hopkins AL. Quantifying the chemical beauty of drugs. *Nature Chemistry*. 2012 ; 4(2):90-98.
6. Rayan A, Marcus D, Goldblum A. Predicting Oral Druglikeness by Iterative Stochastic Elimination. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2010 ; 50(3):437-45.
7. Ohno K, Nagahara Y, Tsunoyama K, Orita M. Are There Differences between Launched Drugs, Clinical Candidates, and Commercially Available Compounds?. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2010 ; 50(5):815-21.
8. Lipinski CA, Lombardo F, Dominy BW, Feeney PJ. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Adv. Drug Deliv. Rev.* 1997 ; 23: 3-25.
9. Veber DF, Johnson SR, Cheng HY, Smith BR, Ward KW, Kopple KD. Molecular properties that influence the oral bioavailability of drug candidates. *J. Med. Chem.* 2002 ; 45:2615-2623.

10. Hou T, Wang J, Zhang W, Xu X. ADME Evaluation in Drug Discovery. 6. Can Oral Bioavailability in Humans Be Effectively Predicted by Simple Molecular Property-Based Rules?. *J. Chem. Inf. Model.* 2007 ; 47:460–463.
11. Xu X, Zhang W, Huang C, Li Y, Yu H, Wang Y, Duan J, Ling Y. A Novel Chemometric Method for the Prediction of Human Oral Bioavailability. *International Journal of Molecular Sciences.* 2012 ; 13:6964–82.
12. TM-MC [cited 2018 Jun 11]. Available from : URL : <http://informatics.kiom.re.kr/compound/>
13. SMILES [cited 2018 Jun 11]. Available from : URL : [https://en.wikipedia.org/wiki/Simplified\\_molecular\\_input\\_line-entry\\_system](https://en.wikipedia.org/wiki/Simplified_molecular_input_line-entry_system)
14. Kim S, Thiessen PA, Bolton EE, Chen J, Fu G, Gindulyte A, Han L, He J, He S, Shoemaker BA, Wang J, Yu B, Zhang J, Bryant SH. PubChem Substance and Compound databases. *Nucleic Acids Res.* 2016 ; 44(D1):D1202–13.
15. ChemDraw Professional v15 [cited 2018 Jun 11]. Available from : URL : [http://www.cambridgesoft.com/Ensemble\\_for\\_Chemistry/ChemDraw/ChemDrawProfessional/Default.aspx](http://www.cambridgesoft.com/Ensemble_for_Chemistry/ChemDraw/ChemDrawProfessional/Default.aspx)
16. O'Boyle NM, Banck M, James CA, Morley C, Vandermeersch T, Hutchison GR. Open Babel: An open chemical toolbox. *Journal of Cheminformatics* ; 2011 ; 3:33.
17. DruLiTo [cited 2018 Jun 11]. Available from : URL : [http://www.niper.gov.in/pi\\_dev\\_tools/DruLiToWeb/DruLiTo\\_index.html](http://www.niper.gov.in/pi_dev_tools/DruLiToWeb/DruLiTo_index.html)
18. Ministry of Food and Drug Safety. The Korean Pharmacopoeia, Tenth Edition. 2014
19. Chinese Pharmacopoeia Commission. Chinese Pharmacopoeia, 2010 English edition, 2010.
20. Hasada K, Yoshida T, Yamazaki T, Sugimoto N, Nishimura T, Nagatsu A, Mizukami H. Quantitative determination of atractylon in *Atractylodis Rhizoma* and *Atractylodis Lanceae Rhizoma* by <sup>1</sup>H-NMR spectroscopy. *Journal of Natural Medicines.* 2010 ; 64(2):161–6.
21. STITCH [cited 2018 Jun 25]. Available from : URL : <http://stitch.embl.de>
22. BindingDB [cited 2018 Jun 25]. Available from : URL : <https://www.bindingdb.org/bind/index.jsp>