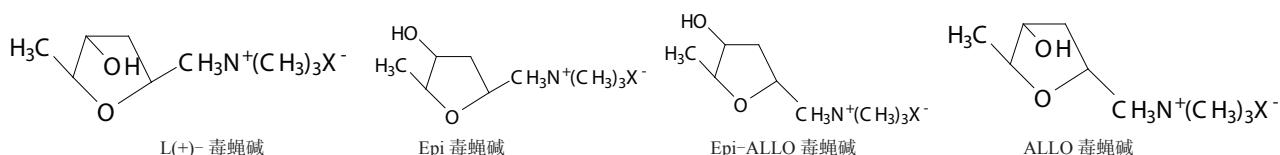
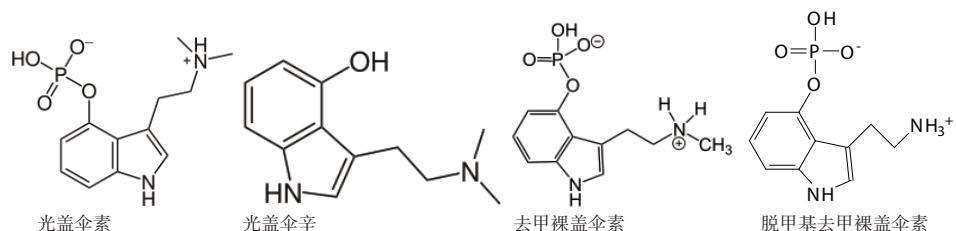


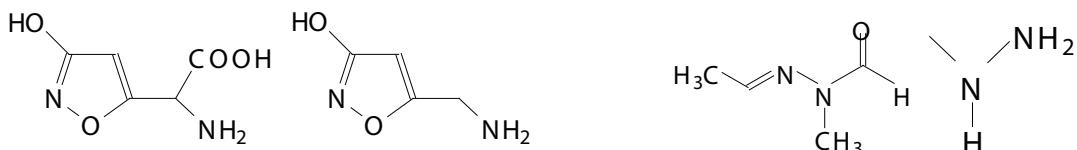
图S1 鹅膏肽类毒蕈毒素基本化学结构式 (a: 鹅膏毒肽; b: 鬼笔毒肽; c: 毒伞素)
Fig.S1 Chemical structures of amatoxins (a: amatoxins; b: phallotoxins; c: virotoxins)



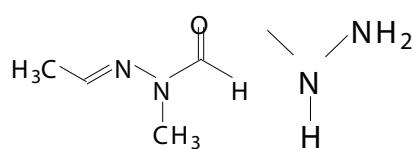
图S2 毒蝇碱化学结构式
Fig.S2 Chemical structures of muscarine



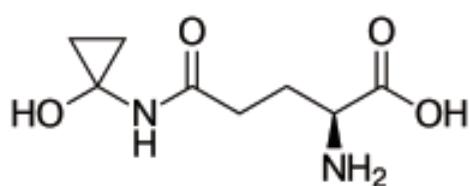
图S3 色胺类毒素化学结构式
Fig.S3 Chemical structures of tryptamines



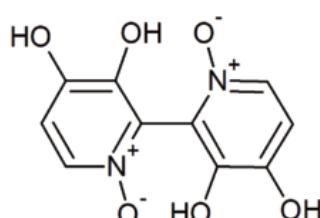
图S4 鹅膏蕈氨酸和异鹅膏胺化学结构式
Fig.S4 Chemical structures of isoxazoles



图S5 鹿花菌素和甲基肼化学结构式
Fig.S5 Chemical structures of gyromitrin



图S6 鬼伞毒素化学结构式
Fig.S6 Chemical structure of coprine



图S7 奥来毒素化学结构式
Fig.S7 Chemical structure of orellanine

表S1 9种鹅膏毒肽分子结构信息表
Table S1 Molecular structural information of 9 amatoxins

序号	名称		R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	分子式	分子量
	中文	英文							
1	α-鹅膏毒肽	α-amanitin	CH ₂ OH	OH	NH ₂	OH	OH	C ₃₉ H ₅₄ N ₁₀ O ₁₄ S	918.97
2	β-鹅膏毒肽	β-amanitin	CH ₂ OH	OH	OH	OH	OH	C ₃₉ H ₅₃ N ₉ O ₁₅ S	919.95
3	γ-鹅膏毒肽	γ-amanitin	CH ₂	OH	NH ₂	OH	OH	C ₃₉ H ₅₄ N ₁₀ O ₁₃ S	902.97
4	ε-鹅膏毒肽	ε-amanitin	CH ₂	OH	OH	OH	OH	C ₃₉ H ₅₃ N ₉ O ₁₄ S	903.96
5	二羟鹅膏毒肽酰胺	amanullin	CH ₃	H	NH ₂	OH	OH	C ₃₉ H ₅₄ N ₁₀ O ₁₂ S	886.86
6	二羟鹅膏毒肽酰胺原	proamanullin	CH ₃	H	OH	OH	OH	C ₃₉ H ₅₄ N ₁₀ O ₁₁ S	870.97
7	二羟鹅膏毒肽羧酸	amanullinic acid	CH ₃	H	NH ₂	OH	H	C ₃₉ H ₅₃ N ₉ O ₁₃ S	887.96
8	三羟鹅膏毒肽	amanin	CH ₂ OH	OH	OH	H	OH	C ₃₉ H ₅₃ N ₉ O ₁₄ S	903.96
9	三羟鹅膏毒肽酰胺	amaninamide	CH ₂ OH	OH	NH ₂	H	OH	C ₃₉ H ₅₄ N ₁₀ O ₁₃ S	902.97

表S2 7种鬼笔毒肽分子结构信息表
Table S2 Molecular structural information of 7 phallotoxins

序号	名称		R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	分子式	分子量
	中文	英文							
1	一羟鬼笔毒肽	phalloin	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	OH	C ₃₅ H ₄₈ N ₈ O ₁₀ S	772.88
2	二羟鬼笔毒肽	phalloidin	CH ₂ OH	CH ₃	CH ₃	CH ₃	OH	C ₃₅ H ₄₈ N ₈ O ₁₁ S	788.87
3	三羟鬼笔毒肽	phallisin	CH ₂ OH	CH ₂ OH	CH ₃	CH ₃	OH	C ₃₅ H ₄₈ N ₈ O ₁₂ S	804.87
4	一羟鬼笔毒肽原	prophalloin	CH ₃	CH ₃	CH ₃	CH ₃	H	C ₃₅ H ₄₈ N ₈ O ₉ S	756.88
5	羟基-羟鬼笔毒肽	phallacin	CH ₃	CH ₃	CH(CH ₃) ₂	COOH	OH	C ₃₇ H ₅₀ N ₈ O ₁₁ S	814.91
6	羟基二羟鬼笔毒肽	phallacidin	CH ₂ OH	CH ₃	CH(CH ₃) ₂	COOH	OH	C ₃₇ H ₅₀ N ₈ O ₁₃ S	846.91
7	羟基三羟鬼笔毒肽	phallisacin	CH ₂ OH	CH ₂ OH	CH(CH ₃) ₂	COOH	OH	C ₃₇ H ₅₀ N ₈ O ₁₄ S	862.91

表S3 6种毒伞素分子结构信息表
Table S3 Molecular structural information of 6 virotoxins

序号	名称		X	R ₁	R ₂	分子式	分子量
	中文	英文					
1	二羟毒伞素	viroidin	SO ₂	CH(CH ₃) ₂	CH ₃	C ₃₈ H ₅₆ N ₈ O ₁₅ S	896.97
2	三羟毒伞素	viroisin	SO	CH(CH ₃) ₂	CH ₃	C ₃₈ H ₅₆ N ₈ O ₁₆ S	912.97
3	丙氨酸羟毒伞素	ala-viroidin	SO ₂	CH ₃	CH ₃	C ₃₆ H ₅₂ N ₈ O ₁₅ S	868.92
4	丙氨酸脱氧羟毒伞肽	ala-desoxoviroidin	SO	CH ₃	CH ₃	C ₃₆ H ₅₂ N ₈ O ₁₄ S	852.92
5	脱氧二羟毒伞肽	desoxoviroidin	SO ₂	CH(CH ₃) ₂	CH ₂ OH	C ₃₈ H ₅₆ N ₈ O ₁₄ S	880.97
6	脱氧三羟毒伞肽	desoxviroisin	SO	CH(CH ₃) ₂	CH ₂ OH	C ₃₈ H ₅₆ N ₈ O ₁₅ S	896.97