

**Table S3:** Quantum Chemical local parameters for saponin by B3LYP/LanL2DZ level with PCM model.

$l_{\text{prot}}$	Mulliken	$f_k^-$	$f_k^+$	%HOMO	%LUMO
C1	-0.504	-0.001	0.000	0.681	0.851
H2	0.195	0.003	0.002	0.125	0.118
H3	0.211	-0.003	-0.002	0.191	0.259
C4	-0.445	0.000	0.000	0.559	0.489
H5	0.183	0.002	0.001	0.115	0.029
H6	0.220	0.001	0.001	0.085	0.117
C7	0.007	0.000	0.003	0.275	1.018
H8	0.218	0.000	-0.006	0.082	0.298
C9	0.407	0.000	0.000	0.380	0.460
C10	-0.486	0.000	0.003	0.770	1.278
H11	0.216	0.005	0.002	0.091	0.037
H12	0.212	0.001	-0.006	0.149	0.262
C13	-0.545	-0.003	0.000	2.123	0.341
H14	0.199	0.005	0.001	0.148	0.052
H15	0.197	0.006	0.001	0.185	0.031
C16	-0.265	-0.005	0.000	2.863	0.345
H17	0.218	0.031	0.000	1.969	0.005
C18	0.407	0.004	0.000	4.016	0.324
C19	-0.047	0.003	0.000	2.390	0.144
H20	0.195	0.016	0.000	0.806	0.042
C21	-0.606	0.000	0.000	1.087	0.182
H22	0.226	0.010	0.000	0.441	0.033
H23	0.214	0.006	0.000	0.126	0.011
C24	-0.157	-0.001	0.000	1.454	0.380
H25	0.157	0.004	0.001	0.124	0.084
C26	0.399	0.005	0.000	2.067	0.718
C27	0.455	0.001	0.000	1.075	0.520
C28	-0.211	-0.001	0.000	0.543	0.851
H29	0.189	0.002	0.002	0.195	0.159
C30	-0.777	0.000	0.000	0.090	0.327
H31	0.205	0.001	0.001	0.006	0.062
H32	0.209	0.001	0.000	0.029	0.024
H33	0.216	0.000	0.000	0.050	0.169
C34	-0.735	0.000	0.000	0.228	0.240
H35	0.206	0.001	0.000	0.026	0.011
H36	0.196	0.001	0.001	0.013	0.031
H37	0.210	0.000	0.000	0.013	0.024
C38	-0.814	0.000	0.000	0.879	0.181
H39	0.211	0.002	0.001	0.136	0.022
H40	0.213	0.002	0.001	0.019	0.028
H41	0.208	0.003	0.000	0.037	0.008

C42	-0.417	-0.003	0.000	2.474	1.289
H43	0.227	0.027	-0.002	1.607	0.344
H44	0.203	0.030	0.001	1.858	0.030
C45	-0.594	0.001	0.000	1.246	0.084
H46	0.225	0.014	0.000	0.601	0.005
H47	0.213	0.005	0.000	0.191	0.014
C48	-0.087	0.001	0.000	1.850	0.034
H49	0.223	0.013	0.000	0.094	0.001
C50	-0.785	0.000	0.000	1.469	0.124
H51	0.216	0.006	0.000	0.258	0.006
H52	0.214	0.007	0.000	0.485	0.007
C53	-0.183	-0.002	0.000	1.948	0.100
C54	0.343	-0.001	0.000	2.286	0.068
C55	-0.530	0.013	0.000	4.294	0.041
H56	0.232	0.016	0.000	0.206	0.003
H57	0.211	0.019	0.000	0.262	0.005
C58	0.019	-0.020	0.000	2.458	0.034
H59	0.198	0.026	0.000	0.972	0.010
O60	-0.391	0.073	0.000	5.234	0.025
C61	-0.742	0.003	0.000	1.829	0.028
H62	0.206	0.006	0.000	0.087	0.001
H63	0.225	0.009	0.000	0.484	0.005
H64	0.211	0.007	0.000	0.027	0.003
O65	-0.563	0.023	0.000	1.863	0.011
H66	0.376	-0.003	0.000	0.205	0.000
C67	-0.408	0.158	0.000	9.565	0.036
H68	0.243	0.021	0.000	0.256	0.003
C69	0.366	0.130	0.000	8.424	0.025
C70	-0.753	-0.011	0.000	2.002	0.008
H71	0.217	0.031	0.000	0.666	0.000
H72	0.216	0.031	0.000	0.651	0.000
H73	0.223	0.012	0.000	0.003	0.000
C74	-0.749	-0.012	0.000	2.014	0.003
H75	0.213	0.030	0.000	1.592	0.001
H76	0.212	0.031	0.000	1.633	0.001
H77	0.224	0.014	0.000	0.046	0.001
O78	-0.439	0.001	-0.001	0.130	0.304
C79	0.098	0.000	0.000	0.172	0.485
C80	-0.072	0.000	0.000	0.189	0.535
H81	0.200	0.000	0.001	0.048	0.067
C82	-0.009	0.000	0.000	0.053	0.477
H83	0.259	0.000	0.001	0.003	0.036
C84	-0.303	0.000	0.000	0.036	0.228
C85	-0.137	0.000	0.000	0.077	0.170

H86	0.247	0.000	0.001	0.011	0.020
H87	0.236	0.000	0.001	0.009	0.031
H88	0.214	0.000	0.001	0.027	0.031
H89	0.251	0.000	0.001	0.005	0.027
O90	-0.386	0.000	0.002	0.027	0.201
C91	0.025	0.000	-0.001	0.014	0.095
C92	-0.057	0.000	0.001	0.007	0.094
C93	-0.500	0.000	0.001	0.003	0.063
H94	0.217	0.000	0.002	0.003	0.027
C95	-0.451	0.000	-0.002	0.010	0.037
H96	0.242	0.000	0.002	0.001	0.009
C97	0.014	0.000	-0.002	0.006	0.061
H98	0.220	0.000	0.002	0.000	0.014
H99	0.217	0.000	0.004	0.001	0.008
C100	-0.007	0.000	0.006	0.004	0.053
H101	0.230	0.000	0.004	0.002	0.003
H102	0.219	0.000	0.004	0.001	0.003
H103	0.225	0.000	0.004	0.001	0.001
H104	0.263	0.000	0.008	0.001	0.010
O105	-0.311	0.000	0.001	0.113	0.140
O106	-0.513	0.000	0.001	0.044	0.063
H107	0.373	0.000	0.000	0.002	0.014
O108	-0.357	0.000	0.001	0.029	0.750
O109	-0.531	0.000	0.002	0.004	0.085
H110	0.373	0.000	0.002	0.000	0.014
C111	-0.401	0.000	-0.002	0.004	0.019
H112	0.195	0.000	0.002	0.000	0.001
H113	0.217	0.000	0.004	0.001	0.002
O114	-0.538	0.000	0.005	0.003	0.011
H115	0.393	0.000	-0.003	0.000	0.001
O116	-0.472	0.000	0.037	0.001	0.024
S117	1.262	0.000	0.074	0.002	0.024
O118	-0.524	0.000	0.057	0.001	0.017
O119	-0.551	0.000	0.053	0.001	0.020
O120	-0.532	0.000	0.042	0.001	0.019
C121	-0.068	0.000	0.000	0.041	0.767
O122	-0.322	0.000	0.010	0.026	0.890
C123	-0.127	0.000	-0.002	0.042	2.676
H124	0.325	0.000	0.005	0.007	0.264
C125	-0.003	0.000	-0.005	0.025	1.356
C126	-0.076	0.000	0.003	0.064	3.021
H127	0.263	0.000	0.012	0.005	0.599
H128	0.255	0.000	0.008	0.009	0.236
H129	0.282	0.000	0.015	0.008	1.283

O130	-0.518	0.000	0.007	0.040	0.834
H131	0.437	0.000	0.000	0.004	0.052
O132	-0.422	0.000	0.073	0.148	12.666
S133	1.270	0.001	0.158	0.270	16.314
O134	-0.527	-0.002	0.117	0.248	12.155
O135	-0.502	0.001	0.119	0.070	10.223
O136	-0.641	0.001	0.078	0.124	13.348
C137	-0.340	0.000	0.000	0.025	1.566
H138	0.202	0.000	0.005	0.001	0.104
H139	0.228	0.000	0.007	0.006	0.193
O140	-0.527	0.000	0.013	0.024	2.133
H141	0.424	0.000	-0.005	0.003	0.213
H142	0.204	0.011	0.000	0.171	0.003
H143	0.214	0.026	0.000	0.925	0.003
O144	-0.371	0.153	0.001	7.036	0.495
H145	0.502	0.000	0.042	0.004	1.390
H146	0.475	0.000	0.017	0.000	0.002

---