

# 中華民國第 63 屆中小學科學展覽會

## 作品說明書

---

國中組 生活與應用科學科(一)

032809

精油所至，病毒離開 - 利用分子模擬對接技術  
預測具新冠病毒防護力的精油

學校名稱：臺中市私立曉明女子高級中學(附設國中)

|                   |                  |
|-------------------|------------------|
| 作者：<br><br>國二 黃紹恩 | 指導老師：<br><br>陳秀芬 |
|-------------------|------------------|

關鍵詞：新冠肺炎病毒蛋白(COVID-19)、精油成分、  
分子模擬對接(Docking)

## 摘 要：

本研究使用電腦模擬藥物的對接技術，快速有效的預測新冠肺炎病毒潛力防護精油。第一階段研究依據化學分子分類蒐集 82 種精油成份，建立分子結構資料集與新冠肺炎病毒蛋白和人類受體蛋白 ACE2 共 11 種蛋白質結構資料集，使用 AutoDock Vina 分子模擬對接技術，計算對接能量數值及溫度圖，預測潛力防護精油成分，並探討預測成效。根據對接結果數值，並與目前已發表研究成果交叉比對，預測效果達 80%。因此第二階段以 30 種台灣常見精油之主要成分擴充精油分子資料集，進行分子模擬對接計算，預測具新冠病毒防護力的潛力常見精油。本次科展研究結果所得的潛力防護精油，不僅具深入研究價值，也為後疫情時代提供具高度參考性的生活防疫方式，用以保護我們身邊所愛的家人。

# 壹、前言

## 一、研究動機：

2022 年暑假我不小心確診新冠肺炎，雖然自己及家人們都注射滿三劑的新冠疫苗，但自己及有些家人們仍然經歷確診及不舒服的病癥過程，想著如果有可以保護我們，又能讓人心情愉快的超級防護罩，那該有多好啊！促使我思考家裡經常使用的精油，是否可增加自己和家人們的保護力，保護我們免於病毒的威脅？

國中一年級自然科生物學（翰林版，國一下）與國一的健康教育課程（南一版，國一下），都讓我們對於病毒的構造與傳播有更多的瞭解，也知道要預防病毒感染有一定的困難度。國一資訊課程（全華圖書，國一上），我們學到一些程式設計概念，有一次我參觀故宮南院時看到虛擬穿衣鏡，了解現在多元化的人工智慧與電腦模擬技術，已逐漸廣泛使用於跨領域研究。因此我將自己的想法和師長們討論後，思考著透過電腦程式計算，利用現代已經成熟的虛擬分子結合技術，可以快速地從精油化學分子資料庫，以及病毒蛋白質的結構數據中，縮短尋找潛力精油的時間及成本，並且透過電腦運算所得的潛力精油化學成分，可對於後續臨床研究將提供高度的可依據性。我也能透過本次的科展實驗，運用國二理化（康軒版，國二上）學到的元素週期表上碳、氫、氧、氮、硫等元素，是有機化學分子的主要構成元素的知識，探討生活中常見精油是由哪些有機化學分子所組成，並認識它們的結構與特性。

本次科展研究我想藉由日常生活中可取得的植物芳香精油，結合電腦模擬運算，尋找能夠提升人類對於新冠病毒的防護力的潛力精油，期待以『精油代替藥物，預防勝於治療』的方式抵抗病毒威脅，對於後疫情時代的防疫也將具高度實用價值。

## 二、研究目的：

此科展研究組合精油成分化學分子結構與現有已知結構之新冠病毒相關之蛋白質結構，當精油成分化學分子與病毒相關蛋白質或人類受體蛋白質 ACE2 結合後，可能改變蛋白質的結構或生理功能，進而阻擋病毒傳播進入細胞，或是影響病毒生理功能或複製。藉由預測精油成分化學分子與病毒相關之蛋白質間愈穩定的結合，預測出具新冠病毒防護力的精油。

**研究目的** 一 探討電腦分子模擬對接技術預測成效，篩選具新冠病毒防護力的潛力精油成分

**想法** 關於新冠病毒 COVID-19 的病毒實驗，需要嚴格控管等級的實驗室，因此一般是無法接觸或使用相關實驗材料。但藉由現在分子電腦模擬對接技術已是個相當成熟的技術，包含前陣子科學家們常使用分子對接的技術用來篩選藥物，並以老藥新用方式尋找治療新冠病毒患者的藥物。此外由於精油包含的化學分子種類繁多數據量大，為了能有效率的篩選預測精

油成分中可能與新冠蛋白質有結合作用的分子，因此這次科展實驗運用電腦分子模擬對接技術，並探討其預測成效。

#### 實驗一 建立精油成分資料集

1. 依據化學官能基分類，蒐集精油成分中代表性化學成分，並列出其分類及名稱。
2. 利用 Python 程式計算出化學分子之三度空間結構。
3. 建立精油成分化學分子名稱及結構資料集。

#### 實驗二 建立蛋白質分子資料集

1. 由國際蛋白質資料庫(UniProt)篩選出新冠病毒蛋白質。
2. 下載已知具三度空間結構的新冠病毒蛋白質之三度空間結構。
3. 下載人類受體蛋白質 ACE2 三度空間結構。
4. 建立蛋白質分子名稱及三度空間結構資料集。

#### 實驗三 使用電腦分子模擬對接技術，預測最佳潛力精油化學成分，及探討預測成效。

1. 使用電腦分子模擬對接程式，計算出精油化學分子及蛋白質分子對接能量數值。
2. 使用對接能量數值，繪製能量數值溫度圖。
3. 依據對接能量平均數值前 20 名之精油成分，探討精油成分分類與新冠病毒結合效果。
4. 由實驗所得最佳潛力精油成分與已發表研究成果比對，驗證此研究方法的預測成效。

**研究目的二** 運用前一個研究目的所得的有效的分子模擬對接技術預測方法，找出台灣常見精油中，具新冠病毒防護力的潛力精油。

**想法** 第一階段研究結果發現，電腦分子模擬對接技術能有效預測出，可能與新冠蛋白質具強結合作用的潛力精油成分，但是對接能量平均數值前 20 名之精油成分，有部分並非來自常見精油，因此第二階段研究，將篩選 30 種台灣常見的精油，擴充精油成分化學分子資料集，運用上一個研究目的所得的預測方法，找出具新冠病毒防護力且常見的潛力精油。

#### 實驗四 建立常見精油之擴充版精油成分資料集

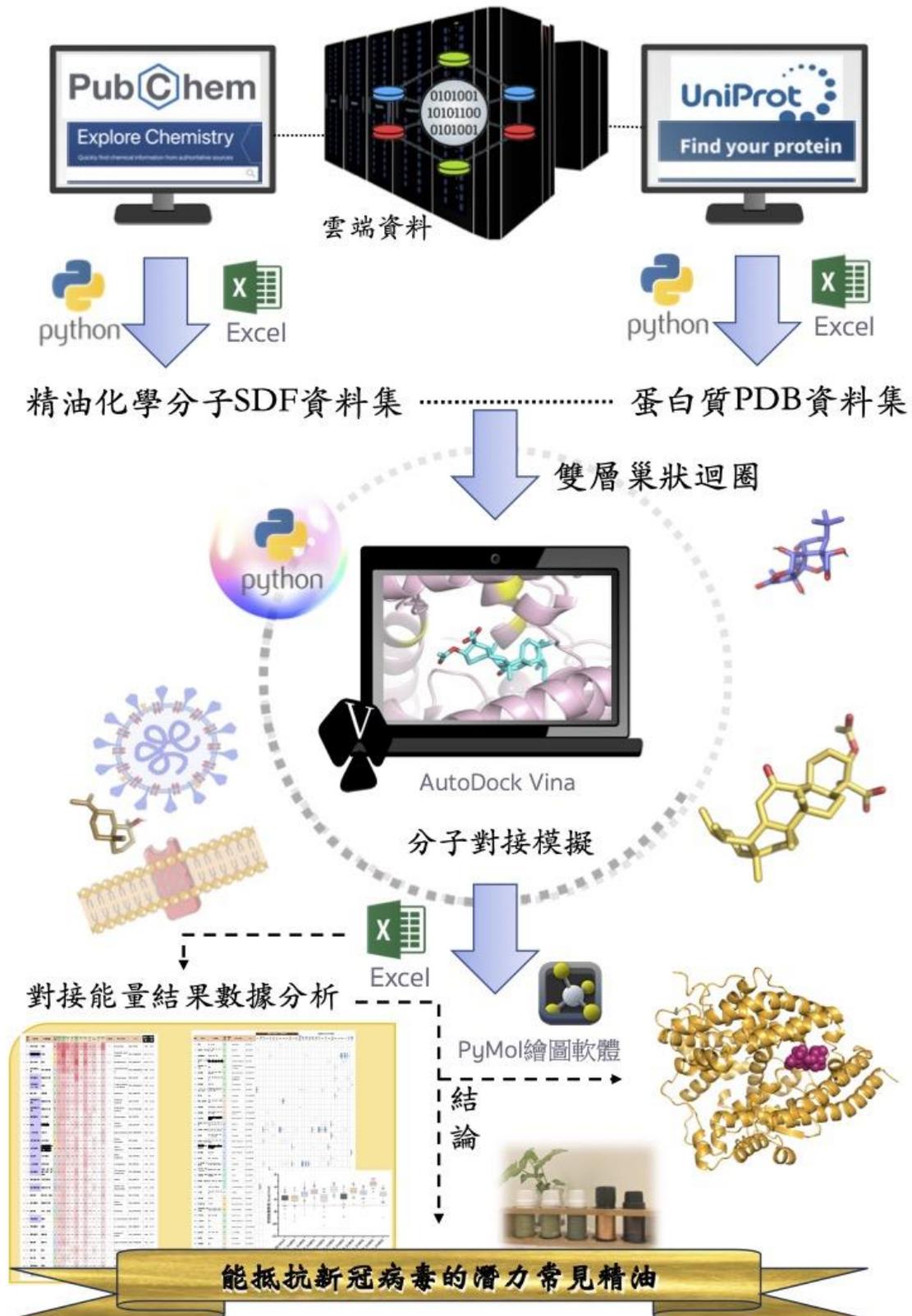
1. 參考精油圖鑑 (溫佑君, 2018)，了解 30 種常見精油中所含主要化學成分及含量比例。
2. 蒐集常見精油所含主要成份之有機化學分子名稱。
3. 比對實驗一，擴充精油成分化學分子數量。
4. 利用 Python 程式計算出化學分子三度空間結構。
5. 建立含 30 種常見精油成分化學分子名稱及結構的資料集，稱擴充版精油成分資料集。

**實驗五** 使用電腦分子模擬對接技術，對應常見精油擴充版精油成分資料集，預測具新冠病毒防護力的潛力常見精油

1. 使用電腦分子模擬對接程式，計算擴充版精油化學分子及蛋白質分子對接能量數值。

2. 使用對接能量數值，繪製成能量數值溫度圖。
3. 探討對接能量具強對接組合之台灣常見精油成分，預測具新冠病毒防護力的潛力常見精油。

### 三、研究架構圖



#### 四、文獻回顧：

##### (一) 新冠肺炎病毒--嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒二型 (COVID-19) 介紹

1. 新冠肺炎病毒屬於正冠狀病毒亞科，顆粒大小約為 100nm。細分為 alpha 屬、beta 屬、gamma 屬與 delta 屬、 omicron 屬變異株。宿主包括蝙蝠（最大宗）、豬、牛、火雞、貓、狗、雪貂等。(衛生福利部疾病管制署, 2020)
2. 新冠肺炎病毒為嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒二型，含有外套膜之單股正鏈 RNA 病毒，外表為圓形，在電子顯微鏡下可看到類似皇冠的突起。
3. 新冠肺炎病毒目前已知有 29 種蛋白質，分成棘蛋白 (S 蛋白)、核蛋白 (N 蛋白)、鞘蛋白 (E 蛋白)、膜蛋白 (M 蛋白)和其他蛋白。(參見圖 1) (徐尚德, 2022)
  - (1) 棘蛋白 (S 蛋白)：冠狀病毒粒子的包膜包含從其表面突出的突起，又稱為刺突糖蛋白 (或 S 蛋白)。棘蛋白介導病毒與宿主人體細胞表面受體蛋白質 ACE2 的附著，並通過協助病毒和宿主細胞膜之間的融合，來促進病毒進入細胞。它是最容易被發現和研究免疫機制的病毒蛋白質，因此是診斷和治療分析的首選目標。
  - (2) 核蛋白 (N 蛋白)：核蛋白幫助病毒 RNA 進入宿主細胞，並與細胞成分相互作用。在感染早期核蛋白是表現最多的蛋白，它與病毒 RNA 結合形成核糖核酸蛋白的聚合體。
  - (3) 鞘蛋白 (E 蛋白)：鞘蛋白是一種微小的整合膜蛋白，五聚體形成跨膜的離子孔，又稱為病毒孔蛋白。它對於病毒的組裝和釋放極為重要。嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒二型的鞘蛋白，在 beta 屬冠狀病毒中，具備保留序列不變異的特性。
  - (4) 膜蛋白 (M 蛋白)：膜蛋白在嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒二型的 beta 屬冠狀病毒中，具備保留序列不變異的特性。它具有三重跨膜結構區域，並促進病毒蛋白組裝。
  - (5) 其他蛋白：複製酶聚合蛋白等。

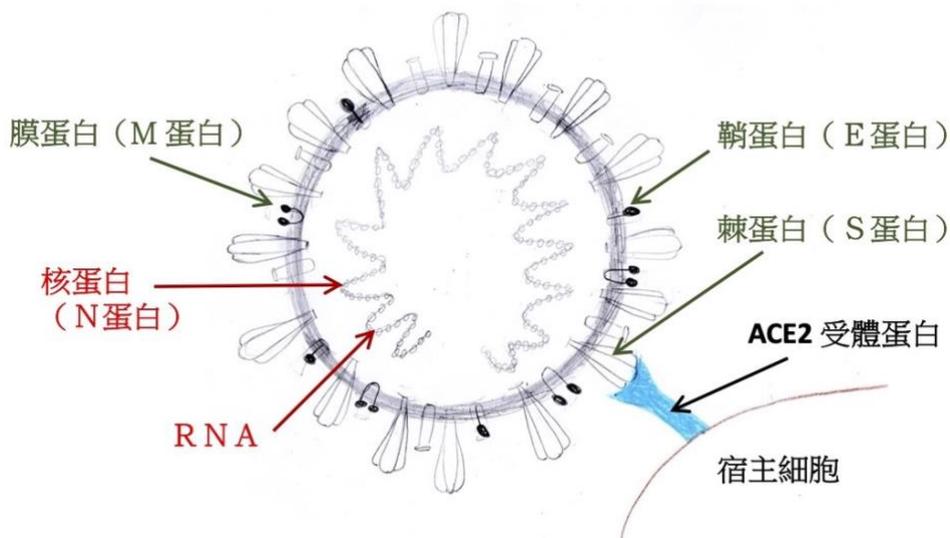
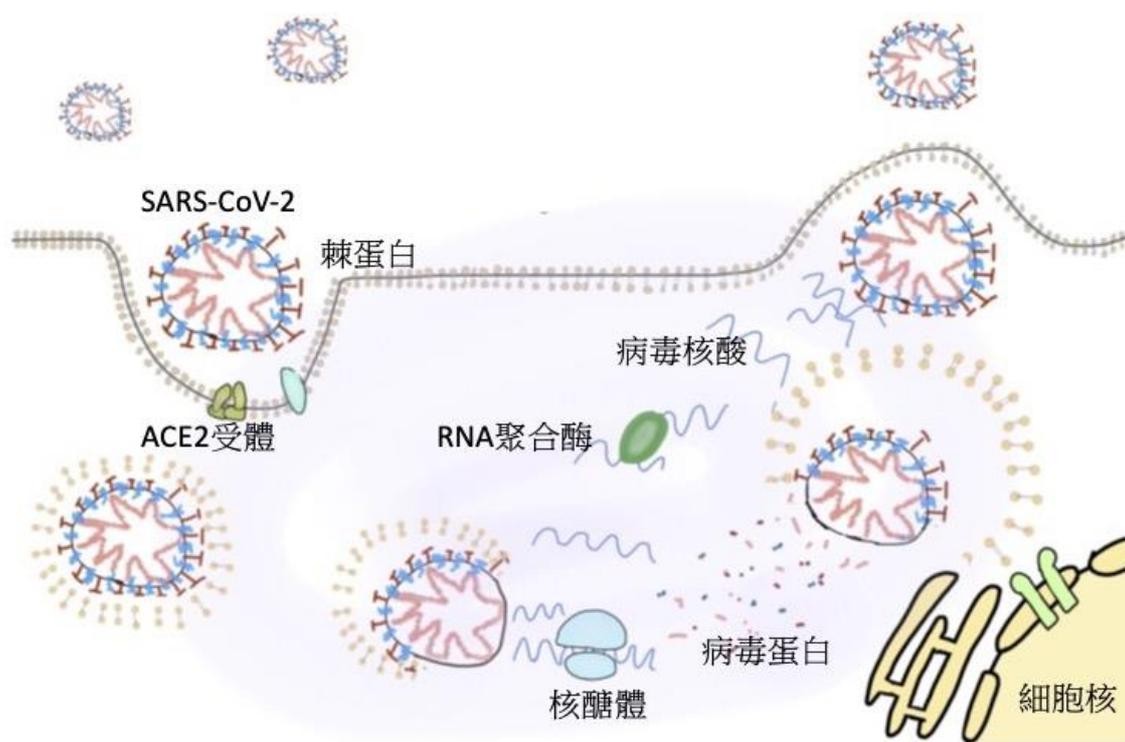


圖 1、新冠肺炎病毒 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒二型病毒分子示意圖。

## (二) 新冠肺炎病毒人類宿主感染機制 (徐尚德, 2022)

新冠肺炎病毒外部的棘蛋白質與人體受體蛋白質 ACE2 結合後才能進入細胞內部，當病毒進入細胞後，順利進行大量複製將造成感染。人類受體蛋白質 ACE2 為細胞膜表面蛋白質，是血管收縮素轉化酶 (ACE) 的同系蛋白質，通常與高血壓、腎素-血管收縮素-醛固酮系統通路和其他心血管系統疾病有關。(參見圖 2)

圖 2、新冠肺炎病毒感染宿主細胞示意圖。



## (三) 預防與治療

1. 疫苗預防：目前市面上常見新冠肺炎疫苗分為 mRNA 疫苗、腺病毒載體疫苗及蛋白質次單元疫苗。(王翰霖 等人, 2014; 衛生福利部疾病管制署, 2021)

|    | mRNA 疫苗                                 | 腺病毒載體疫苗                                 | 蛋白質次單元疫苗                           |
|----|---|---|------------------------------------|
| 原理 | 含新冠病毒棘蛋白的 mRNA，使人體製造棘蛋白抗原，刺激免疫系統對抗病毒入侵。 | 使用腺病毒帶新冠病毒棘蛋白 DNA，誘發人體製造棘蛋白，啟動免疫系統對抗病毒。 | 以基因工程生產病毒棘蛋白製成疫苗，人體偵測到重組蛋白質產生免疫反應。 |
| 名稱 | 莫德納、BNT                                 | AZ                                      | 高端、Novavax                         |

2. 抗病毒藥物治療：使用小分子藥物抑制病毒侵入或抑制病毒轉錄過程，達到治療效果，例如瑞德西韋可抑制 3CL 病毒複製蛋白作用。科學界尋找新藥的時候，常使用分子結合模擬預測技術縮短藥物開發時間。

#### (四) 分子模擬對接技術

1. 分子模擬對接計算可提供新藥開發研究者進一步的分子結構資訊，包含小分子或蛋白質的氫鍵作用力、極性與非極性作用力、小分子結構變化等資訊，提供以結構為基礎之藥物設計方向。分子對接主要研究分子間（如化學分子和蛋白質）的結合作用，並預測其結合模式和親合力的一種模擬方法，分子對接已成為計算機輔助藥物研究領域的一項重要技術。
2. 小分子模擬對接計算軟體，藉由對接計算方法針對特定蛋白質的活化位，進行電腦虛擬篩選小分子巨量資料庫。(維基百科, 2020)
3. 分子模擬對接方法需進行簡化，根據簡化的程度和方式，可以將分子對接方法分為三類：剛性對接、全柔性與半柔性對接。其中半柔性對接方式允許對接過程中小分子結構變化，並固定大分子蛋白質的結構，是比較廣泛的對接方法之一。AutoDock Vina 分子對接軟體 (Eberhardt 等人, 2021) 應用半柔性對接方法，以結合能量 (單位是 kcal/mol) 作為評量對接結果的依據。

## 貳、研究設備及器材

- 一、電腦軟體研究設備：Python 3.8 編程軟體，Jupyter NoteBook 編程環境，PyMOL 蛋白質結構繪製軟體，AutoDock Vina 分子對接軟體 (Eberhardt 等人, 2021)，盲對接輔助計算軟體。
- 二、精油主要參考資料：新精油圖鑑 300 種精油科研新知集成 (作者: 溫佑君，出版社: 商周出版)。
- 三、精油化學分子名稱及結構資料：國際化學資料庫 (PubChem)。
- 四、蛋白質名稱及結構資料：國際蛋白質資料庫 (UniProt)，與國際蛋白質結構資料庫 (RCSB PDB)。

## 參、研究過程或方法

**研究目的** 一 探討電腦分子模擬對接技術預測成效，篩選具新冠病毒防護力的潛力精油成分。

**實驗** 一 建立精油成分資料集

步驟：

- 一、依據化學官能基分類 (烯、醚、酮、醇、醛、酸、酚、酯及氧化物類) 蒐集 82 種精油成分，以 Excel 整理製作，手動輸入化學分子名稱及其所代表之精油名稱。

二、以 Python 程式 1、Pandas 表格存取模組及 Excel 整理化學分子名稱，轉換為精油成分化學分子字串表示式 SMILES。

三、以 Python 程式 2、Pandas 表格存取模組及 Excel 將精油內含物分子字串表示式 SMILES 轉換為三度空間化學結構檔案(SDF)資料庫，完成精油成分化學分子結構預備工作。

圖 3、(A) Python 程式 1。(B) 化學分子名稱轉為化學分子字串表示式 SMILES 及三

(A)

```
# Python程式1
# 匯入所使用的套件
import re # 常規表示套件
import os # 系統檔案及資料夾套件
import pandas as pd # 表格套件
import time # 時間套件
import requests # 網路爬蟲套件
from bs4 import BeautifulSoup
import json
from rdkit import Chem # 化學套件
from rdkit.Chem import AllChem # 化學套件
##### 主程式 #####
workpath='./Joanne/drug_list'
os.chdir(workpath) # 換至工作目錄
sdfpath='./Joanne/docking' # 設定輸出目錄
file0='essential_oil.xlsx' # 設定輸入檔案名稱
df_drug=pd.read_excel(file0) # 使用pandas 表格套件輸入收集的Excel
df_drug=df_drug.dropna(subset=['化學名'])
df_drug=df_drug.reset_index(drop=True)
# 針對每一化合物抽取化學結構式並且利用程式二轉換成藥物三維結構檔
for i, readCPDname in enumerate (df_drug['英文化學名']):
    cid,smiles=CPDname2CANONICALsmiles(readCPDname) # 抓取化學資料
    filenameSDF=re.sub('\s+',',',readCPDname) # 定義化學分子三維檔案名稱
    filenameSDF=re.sub('\n+',',',filenameSDF)
    filenameSDF=re.sub('-',',',filenameSDF)
    filenameSDF=re.sub('_',',',filenameSDF)
    filenameSDF=re.sub('\.',',',filenameSDF)
    filenameSDF=re.sub('\.',',',filenameSDF)
    filenameSDF=re.sub('\.',',',filenameSDF)
    filenameSDF=re.sub('\.',',',filenameSDF)
    df_drug.at[i,'CID']='CID_'+str(cid) # 存入化學分子CID編號
    df_drug.at[i,'SMILES']=smiles # 存入化學分子字串表示式SMILES資料
    filenameSDF='CID_'+str(cid)+'_'+filenameSDF+'.sdf' # 定義化合物三維
    檔案名稱
    filenameSDF=smiles2SDF(sdfpath,readCPDname,filenameSDF,smiles) #
    將化合物轉換為藥物三維檔案
    df_drug.at[i,'filenameSDF']=filenameSDF # 存入化學分子三維檔案名稱
os.chdir(workpath)
df_drug.to_excel('essential_oil_clean.xlsx') # 寫入Excel 檔案
```

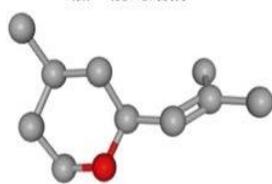
(B)

玫瑰醚 (CID\_27866)

SMILES 化學字串 CC1CCOC(C1)C=C(C)C

| 有機官能基    | 化學分類 | 化學名 | 英文化學名      |  |
|----------|------|-----|------------|---|
| (R-O-R') | 醚    | 玫瑰醚 | Rose oxide |   |

加H前的結構



加H後的結構



(C)

```
# Python程式2
# 匯入所使用的套件
from rdkit import Chem # 化學套件
from rdkit.Chem import AllChem # 化學套件
def smiles2SDF(sdfpath,chemicalname,filenameSDF,smiles): # 定義化學藥物轉換
    為藥物三維檔案之操作模組
    try:
        mol=Chem.MolFromSmiles(smiles) # 由SMILES分子表示式輸入化學分子
        molH=Chem.AddHs(mol) # 標準氫化
        AllChem.EmbedMolecule(molH,useRandomCoords=True,maxAttempts=500)
        # 將化學分子轉換為三維立體模型
        molecular = Chem.RWMol(molH) # 將三維立體模型轉換為立體空間座標
        AllChem.MMFFOptimizeMoleculeConfs(molecular,10000) # 將原子的立體空
        間座標進行能量最小化
        print ('write SDF', chemicalname, filenameSDF)
        os.chdir(sdfpath) # 換至輸出目錄
        Chem.MolToMolFile(molecular,filenameSDF) # 寫入化學分子三維檔案
    except:
        print ('skip chemical : ', chemicalname, filenameSDF)
        filenameSDF='' # 若不能輸出則略過此化學物質
    return(filenameSDF)
```

度空間分子結構 (C) Python 程式 2

## 實驗二 建立蛋白質分子資料集

步驟：

- 一、由國際蛋白質資料庫 (UniProt) 篩選出具有已知結構之目標蛋白質。
- 二、由國際蛋白質結構資料庫 (RCSB PDB) 下載 10 個新冠病毒蛋白質三度空間結構資料。
- 三、由國際蛋白質結構資料庫 (RCSB PDB) 下載 1 個人類蛋白質 ACE2 三度空間結構資料。
- 四、以 Python 程式 3、Pandas 表格存取模組及 Excel 整理蛋白質結構資料，清除其他非蛋白質結構資訊，並使用 AMBER 的標準蛋白質力場修正蛋白質氨基酸分子內原子鍵結，完成蛋白質結構預備工作。(如圖 4)

```

# Python程式 3
# 匯入所使用的套件
import re # 常規表示套件
import os # 系統檔案及資料夾套件
import pandas as pd # 表格套件
import time # 時間套件
import requests # 網路爬蟲套件
from bs4 import BeautifulSoup
import json
##### 主程式 #####
workpath='./Joanne/protein_list'
os.chdir(workpath) # 換至工作目錄
file0='uniprot-compressed_true_download_true_fields_accession_2Crevi
wed_2C-2022.11.29-13.26.01.53.xlsx' # 設定輸入檔案名稱
df_protein=pd.read_excel(file0) # 使用pandas表格套件輸入所搜集的蛋白質Exc
el檔案
df_protein=df_protein.loc[df_protein['3D'].notna()]
proteinlistout='protein_listpdb.csv' # 設定輸出檔案名稱
df_protein=df_protein.reset_index(drop=True)
# 針對每一蛋白質抓取三維結構結構資料
for i, Entry in enumerate(df_protein['Entry']):
    PDBdf,pdbid,pdbfileamberH=PROTEIN2PDBid(workpath,Entry) # 抓取蛋白
質名稱及代號資料
    df_protein.at[i,'pdbid']=pdbid # 存入蛋白質三維結構PDB編號
    df_protein.at[i,'pdbfileamberH']=pdbfileamberH # 存入蛋白質三維結構
PDB檔案名稱
df_protein.to_excel('protein_list.xlsx') # 將查詢結果寫入Excel 檔案

```

圖 4、Python 程式 3

**實驗三** 使用電腦分子模擬對接技術，預測潛力精油化學成分，及探討預測成效。

步驟：

- 一、以 Python 程式與分子模擬對接技術，進行雙層巢狀迴圈之排列組合。第一層樣本為實驗一 82 個精油成分化學分子結構檔案(SDF)，第二層樣本為實驗二 11 個蛋白質結構檔案(PDB)。(如圖 5)
- 二、使用 AutoDock Vina 進行分子對接模擬計算，生成對接能量數值。
- 三、輸出精油成分化學分子與病毒蛋白質分子的對接能量數值，用 Excel 繪製成對接能量溫度圖預測出有新冠病毒防護力的潛力精油化學成分。
- 四、搜尋已發表的學術相關研究，探討驗證使用電腦分子模擬對接技術，預測潛力精油化學成分的預測效能。

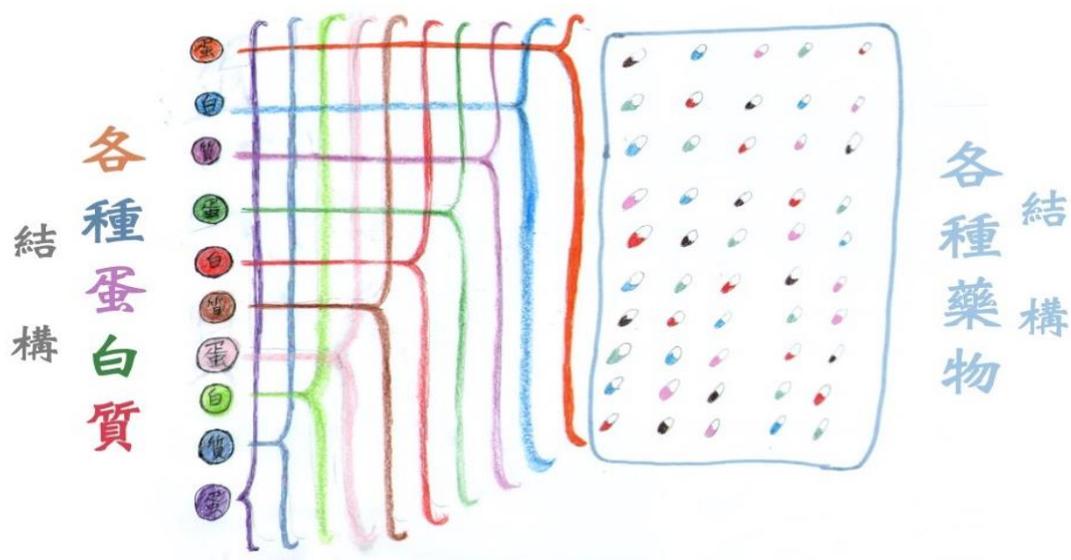


圖 5、巢狀迴圈示意圖

#### 實驗四 建立常見精油成分擴充版化學分子資料集

步驟：

- 一、參考精油圖鑑，選出 13 種台灣為主要產區之一，與 17 種台灣非主要產區，共 30 種常見精油及其所含主要化學成分及含量比例，比對實驗一加入未被蒐集到的化學成分，擴充精油成分化學分子數量至編號 113，以 Excel 整理製作輸入精油名稱及其內含主要化學分子名稱。
- 二、以 Python 程式 1、Pandas 表格存取模組及 Excel 整理化學分子名稱，轉換為精油成分化學分子字串表示式 SMILES。
- 三、以 Python 程式 2、Pandas 表格存取模組及 Excel 將精油內含物分子字串表示式 SMILES 轉換為三度空間化學結構資料庫，完成常見精油成分擴充版化學結構資料集。

#### 實驗五 使用電腦分子模擬對接技術，對應常見精油擴充版精油成分資料集，預測具新冠病毒防護力的潛力常見精油

步驟：

- 一、以 Python 程式與分子模擬對接技術，將實驗四中擴充版精油成分化學分子結構 SDF 與實驗二中 11 個蛋白質結構 PDB，進行雙層巢狀迴圈之排列組合。
- 二、使用 AutoDock Vina 進行分子對接模擬計算，生成對接能量數值。
- 三、輸出擴充版精油成分化學分子與病毒蛋白質結合對接能量數值，用 Excel 繪製對接能量溫度圖，比較與實驗三的結果差異。
- 四、依據對接能量數值具強對接組合之常見精油成分，預測出有新冠病毒防護力的常見精油。
- 五、選擇精油化學分子與蛋白質結構對接能量最低的組合，以 PyMOL 繪製對接三度空間結構圖，視覺圖像化呈現分子對接模擬計算後，所預測到的對接位置。

## 肆、研究結果

**研究目的** 一 探討電腦分子模擬對接技術預測成效，篩選具新冠病毒防護力的潛力精油成分。

### 精油成分資料集

這次科展研究依據有機化學分子以官能基分類，分成烯 (C=C)、醚 (R-O-R')、酮 (R-C=O)、醇(R-OH)、醛 (R-OH)、酸 (R-COOH)、酚 (BZ-OH)、酯類 (ROOR')及氧化物，匯集各類別中具有代表性精油的化學分子，共蒐集 82 種精油成分。

依據實驗資料分類歸納進行編號，結果得到編號 1-22 為烯類，以綠色表示，是精油成分中最常見的化學分子類別。編號 23-28 為醚類，以藍色表示。編號 29-41 為酮類，以橘色表示，生活常見精油薄荷、馬鞭草、薰衣草、迷迭香都含有酮類化學成分。編號 42-58 為醇類，以淺藍色表示，是精油成分含量中第二多的成分，代表性精油有檀香木、檜木、花梨木、廣藿香、德國洋甘菊、綠花白千層等。編號 59-72 為醛類，以湖水綠色表示，代表性精油常見的有香茅、佛手柑、甜橙、橙花、茴香。酸類，以粉紅色表示，是常見精油中，成份種類最少的化學分類，本研究僅蒐集編號 73，為存在於甘草精油中的甘草次酸。編號 74-76 為酚類，以白色表示。編號 77-81 為酯類，以黃色表示。氧化物也是精油成分中較少的類別，以灰色表示，本研究蒐集編號 82 咖啡因，存在於咖啡精油中。

將精油成分化學分子的英文化學名稱以 Python 程式 1&2 (圖 3) 進入國際化學資料庫 PubChem 中進行自動化查找該分子之 CID 化學身份證及化學式的 SMILES 字串，接著使用 Pandas 模組下載至 Excel 數據資料集中，並使用 RDKit 模組將精油化學分子的 SMILES 字串轉換為三度空間化學結構檔案 SDF 資料庫，完成較大數量的精油成分資料集。(表 1)



|    | 蛋白質代號       | 蛋白質名稱                | 生物體                              | 三維結構 PDB 編號 |
|----|-------------|----------------------|----------------------------------|-------------|
| 1  | R1A_SARS2   | 複製酶聚合蛋白 1a (3CL 蛋白酶) | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-2)  | 7D47        |
| 2  | SPIKE_SARS2 | 刺突糖蛋白                | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-4)  | 7SBP        |
| 3  | NCAP_SARS2  | 核蛋白                  | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-5)  | 6YI3        |
| 4  | VEMP_SARS2  | 包膜小膜蛋白 (鞘蛋白)         | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-6)  | 7K3G        |
| 5  | VME1_SARS2  | 膜蛋白                  | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-7)  | 7VGR        |
| 6  | AP3A_SARS2  | 附屬非重疊轉譯區 ORF3a 蛋白    | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-8)  | 6XDC        |
| 7  | NS6_SARS2   | 附屬非重疊轉譯區 ORF6 蛋白     | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-9)  | 7VPH        |
| 8  | NS8_SARS2   | 附屬非重疊轉譯區 ORF8 蛋白     | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-10) | 7JTL        |
| 9  | NS7A_SARS2  | 附屬非重疊轉譯區 ORF7a 蛋白    | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-12) | 7CI3        |
| 10 | ORF9B_SARS2 | 附屬重疊轉譯區 ORF9b 蛋白     | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒 2 型 (SARS-CoV-14) | 6Z4U        |
| 1  | ACE2_HUMAN  | ACE2 受體蛋白            | 人類                               | 7DQA        |

表 2、病毒及人類受體蛋白質分子資料集

\* 原始蛋白質資料由國際蛋白質資料庫 UniProt 網站下載。

### 電腦分子模擬對接，預測潛力精油化學成分

進行分子對接程式時，需先將分子結構重複的化學分子去除，且程式中也會自動刪除無法進行對接的精油化學分子，因此實驗三結果得到 73 種化學分子與 11 種蛋白質組合對接後的對接能量數值。分子模擬對接的能量數值愈低，代表分子間的結合愈穩定，以結合能（單位：kcal/mol）作為評量對接結果的依據：分子間強結合性，即結合親和力小於等於閾值 -7 kcal/mol 的交互作用，分子間一般結合性，即結合親和力介於 -5 kcal/mol 與 -7 kcal/mol 之間的交互作用。依據各個化學分子與 11 種蛋白質組合對接能量數值平均值，由低到高進行排

序，以 Excel 整理繪製成分子對接能量數值溫度圖（附錄一），溫度差異以紅色表示，結合力越強則顏色越深。

第一階段研究結果對接能量溫度圖，73 個精油化學分子中獲得 38 個分子對接能量數值屬強結合性（結合親和力小於等於  $-7 \text{ kcal/mol}$ ）的對接組合，共 11 種精油化學成分，分別為甘草次酸、銀杏內酯、粉背蕨烯二醇、母菊藍烯、呋喃桉葉-1,3-二烯、維生素 A、苯甲酸苄酯、大西洋酮、甜沒藥烯、纈草酮和檀香醇，為對接能量數值平均值排序第一到第十與第十四的精油成分。顏色最深的數值是編號 77 銀杏內酯對接病毒 NS6\_SARS2 蛋白，能量數值  $-10.2 \text{ kcal/mol}$ ，為最穩定結合。編號 73 甘草精油中的甘草次酸，對接病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 的組合，能量數值為  $-9.6 \text{ kcal/mol}$ ，為第二小數值。編號 16 母菊藍烯對接病毒 NS6\_SARS2 的能量數值  $-8.8 \text{ kcal/mol}$  為第三組強結合性組合。（如圖 6）

由蛋白質群觀察 38 個分子對接能量數值屬強結合性的對接組合，占比最高的三種蛋白質為：人體受體蛋白質 ACE2 七組、病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 十組和病毒蛋白 NS6\_SARS2 九組。（如圖 6）

精油化學分子與蛋白質結構對接能量平均值，由低到高排序前 20 名，對接能量平均值在  $-5.4$  以下，具備分子間一般結合性（小於  $-5 \text{ kcal/mol}$ ）的交互作用。對接能量數值平均值前五名精油化學成分，排序第一為編號 73 酸類，甘草精油中的甘草次酸，CID\_10114，對接能量平均值為  $-8.1 \text{ kcal/mol}$ ，對於 11 種目標蛋白皆有強結合性或一般結合性對接效果。排序二是編號 77 酯類，銀杏精油中的銀杏內酯，CID\_6324617，對接能量平均值為  $-7.2 \text{ kcal/mol}$ 。排序三是編號 56 醇類，深山粉背蕨中的粉背蕨烯二醇，CID\_90658392。排序四是編號 16 烯類的母菊藍烯，CID\_10719，代表精油為德國洋甘菊精油，對接能量平均值為  $-6.3 \text{ kcal/mol}$ 。排序五編號 12 的呋喃桉-1,3-二烯，CID\_22298470，代表精油為沒藥，對接能量平均值也為  $-6.3 \text{ kcal/mol}$ 。對接能量平均值排序二到五的精油化學成分，若排除與鞘蛋白 VEMP\_SARS2 的對接結合親和力大於  $-5 \text{ kcal/mol}$  以外，與其他 10 種目標蛋白，也皆有強結合性或一般結合性對接效果。（如圖 6）

此五項精油成分已有與新冠病毒或其他病毒相關的學術研究者，有甘草次酸（葛孚晶 等人, 2021）、銀杏內酯（劉新娟 等人, 2020）、德國洋甘菊精油的母菊藍烯（精油大百科, 2021; Silva 等人, 2020）與沒藥精油的呋喃桉葉-1,3-二烯（Alyafei, 2020），相當於 80% 預測效能。顯示這次的研究所建立的篩選模式具深入研究價值，因此推測本次研究為有效預測潛力新冠病毒防護精油的方法。

| 編碼 | 化學名 | 代表精油                 | 化學分類             | ACE2_HUMAN | SPIKE_SARS2 | AP3A_SARS2 | NCAP_SARS2 | NS6_SARS2 | NS7A_SARS2 | NS8_SARS2 | ORF9B_SARS2 | R1A_SARS2 | VEMP_SARS2 | VME1_SARS2 | 化學結構 | 英文化學名   | CID                    | 最小值          | 平均值   |      |
|----|-----|----------------------|------------------|------------|-------------|------------|------------|-----------|------------|-----------|-------------|-----------|------------|------------|------|---|------------------------|--------------|-------|------|
| 1  | 73  | 甘草次酸                 | 甘草               | 酸          | -9.1        | -9.6       | -8.6       | -7.6      | -8.9       | -7.0      | -8.9        | -6.8      | -7.2       | -5.9       | -9.0 |    | Enoxolone              | CID_10114    | -9.6  | -8.1 |
| 2  | 77  | 銀杏內酯                 | 銀杏               | 酯          | -8.4        | -9.0       | -6.8       | -7.2      | -10.2      | -5.5      | -8.8        | -5.9      | -6.6       | -4.2       | -6.7 |    | Ginkgolide B           | CID_6324617  | -10.2 | -7.2 |
| 3  | 56  | 粉背蕨烯二醇               | 深山粉背蕨            | 醇          | -7.6        | -8.6       | -7.6       | -6.7      | -8.1       | -5.6      | -7.4        | -5.7      | -6.5       | -4.7       | -6.4 |    | Cheilanthenediol       | CID_90658392 | -8.6  | -6.8 |
| 4  | 16  | 母菊藍烯                 | 德國洋甘菊            | 烯          | -7.1        | -6.6       | -6.2       | -5.7      | -8.8       | -5.8      | -6.8        | -5.6      | -5.6       | -4.9       | -6.3 |    | Chamazulene            | CID_10719    | -8.8  | -6.3 |
| 5  | 12  | 呋喃桉葉-1,3-二烯          | 沒藥               | 烯          | -7.1        | -7.5       | -6.5       | -6.0      | -7.0       | -5.3      | -7.3        | -5.9      | -5.9       | -4.3       | -6.3 |    | Furanoedesma 1,3-Diene | CID_22298470 | -7.5  | -6.3 |
| 6  | 22  | 維生素A                 | 胡蘿蔔              | 烯          | -7.5        | -7.0       | -6.2       | -5.6      | -7.1       | -5.5      | -7.2        | -5.4      | -5.9       | -4.7       | -6.4 |    | Vitamin A              | CID_445354   | -7.5  | -6.2 |
| 7  | 79  | 苯甲酸苄酯                | 大花茉莉             | 酯          | -7.1        | -7.0       | -6.0       | -5.3      | -7.1       | -5.1      | -6.2        | -5.2      | -6.0       | -4.1       | -6.5 |    | Benzyl Benzoate        | CID_2345     | -7.1  | -6.0 |
| 8  | 40  | 大西洋酮                 | 大西洋雪松、喜馬拉雅雪松、鬱金香 | 酮          | -6.9        | -7.0       | -6.3       | -5.8      | -7.3       | -4.8      | -6.7        | -5.0      | -5.9       | -3.8       | -5.7 |    | alpha-Atlantone        | CID_12299868 | -7.3  | -5.9 |
| 9  | 14  | 甜沒藥烯                 | 沒藥、薑、德國洋甘菊、黑胡椒   | 烯          | -6.9        | -7.1       | -5.6       | -5.4      | -7.4       | -4.9      | -6.5        | -4.7      | -5.4       | -4.2       | -6.1 |    | (Z)-gamma-bisabolene   | CID_3033866  | -7.4  | -5.8 |
| 10 | 41  | 纈草酮                  | 穗甘松、纈草           | 酮          | -6.3        | -7.1       | -5.8       | -5.2      | -6.3       | -4.9      | -6.7        | -5.6      | -4.9       | -4.0       | -6.6 |    | Valeranone             | CID_171455   | -7.1  | -5.8 |
| 11 | 50  | 甜沒藥醇                 | 德國洋甘菊            | 醇          | -6.5        | -6.9       | -5.8       | -5.0      | -6.5       | -4.9      | -6.8        | -5.0      | -5.7       | -4.3       | -6.0 |    | alpha-bisabolol        | CID_442343   | -6.9  | -5.8 |
| 12 | 62  | 纈草醛                  | 甘松、纈草            | 醛          | -6.5        | -6.5       | -6.0       | -5.4      | -6.8       | -4.7      | -6.7        | -5.6      | -5.1       | -4.1       | -5.9 |    | Valerenal              | CID_6440942  | -6.8  | -5.8 |
| 13 | 54  | 廣藿香醇                 | 廣藿香              | 醇          | -6.4        | -6.4       | -5.6       | -5.2      | -6.6       | -4.7      | -6.6        | -5.7      | -4.8       | -4.2       | -6.4 |    | patchouli alcohol      | CID_10955174 | -6.6  | -5.7 |
| 14 | 51  | 檀香醇                  | 檀香木              | 醇          | -6.5        | -7.2       | -6.0       | -5.2      | -5.9       | -4.9      | -6.5        | -5.2      | -5.1       | -3.8       | -5.5 |   | alpha-santalol         | CID_11085337 | -7.2  | -5.6 |
| 15 | 49  | 檜木醇                  | 檜木               | 醇          | -6.4        | -5.9       | -5.4       | -5.7      | -6.8       | -5.3      | -6.0        | -4.9      | -5.8       | -3.7       | -5.6 |  | Hinokitiol             | CID_3611     | -6.8  | -5.6 |
| 16 | 21  | 莪木烯                  | 沒藥               | 烯          | -6.1        | -6.5       | -5.9       | -5.2      | -6.1       | -5.1      | -6.4        | -5.4      | -5.2       | -3.7       | -5.5 |  | Curzerene              | CID_12305301 | -6.5  | -5.6 |
| 17 | 3   | 茵陳烯炔                 | 茵陳               | 烯          | -6.4        | -6.1       | -5.1       | -5.1      | -6.7       | -4.7      | -5.8        | -4.8      | -5.3       | -4.2       | -6.2 |  | Capillene              | CID_3083613  | -6.7  | -5.5 |
| 18 | 37  | $\beta$ -突厥酮 / 大馬士革酮 | 玫瑰               | 酮          | -5.9        | -6.5       | -5.9       | -5.0      | -5.9       | -4.9      | -6.2        | -4.9      | -5.2       | -3.8       | -5.7 |  | damascenone            | CID_5366074  | -6.5  | -5.4 |
| 19 | 52  | 金合歡醇                 | 玫瑰、依蘭            | 醇          | -6.2        | -6.0       | -5.6       | -4.9      | -6.2       | -4.8      | -6.0        | -4.7      | -5.7       | -3.4       | -5.5 |  | farnesol               | CID_445070   | -6.2  | -5.4 |
| 20 | 75  | 香薷芥酚                 | 野馬鬱蘭             | 酚          | -6.0        | -5.7       | -4.8       | -5.7      | -6.4       | -4.7      | -6.0        | -5.1      | -5.4       | -3.6       | -5.5 |  | Carvacrol              | CID_10364    | -6.4  | -5.4 |

圖 6、實驗三分子模擬對接能量平均值排序前 20 名精油成分二度空間溫度表。顏色越深的組合代表該精油化學分子與蛋白質結合能力越穩定。（溫度圖總表於附錄一）

接著更進一步將圖 6 中的對接能量數值，根據蛋白質分群繪製成精油化學分子與蛋白質分子模擬對接能量數值之箱型圖（圖 7）。蛋白質分群對接能量箱型圖中顯示箱型底標 10%數值，對接能量最低的三種蛋白質為：人體受體蛋白質 ACE2、病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 和病毒核蛋白 NS6\_SARS2，其中蛋白質與精油化學分子對接能量落在  $-7 \text{ kcal/mol}$  以下，且此三種蛋白質在對接數值屬強結合性的組合中，為占比最高的三種蛋白質，因此具有高度潛力作為深入研究的目標蛋白質。這三種蛋白質比較發現，人體受體蛋白質 ACE2 的對接能量數值箱型區間（25-75%，中間 50%數值）最為集中約為  $-6 \text{ kcal/mol}$ ，表示該蛋白質與各種精油化學分子，進行分子模擬對接時，多數對接組合有一般性結合以上的結合效果。病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 蛋白質分群能量表的箱型區間較分散，而病毒蛋白 NS6\_SARS2 為此三種蛋白

中，蛋白質分群能量表箱型區間最分散的群組，相較於人體受體蛋白質 ACE2 和 SPIKE\_SARS2 蛋白質，會有較多的對接組合未達一般性結合能量。

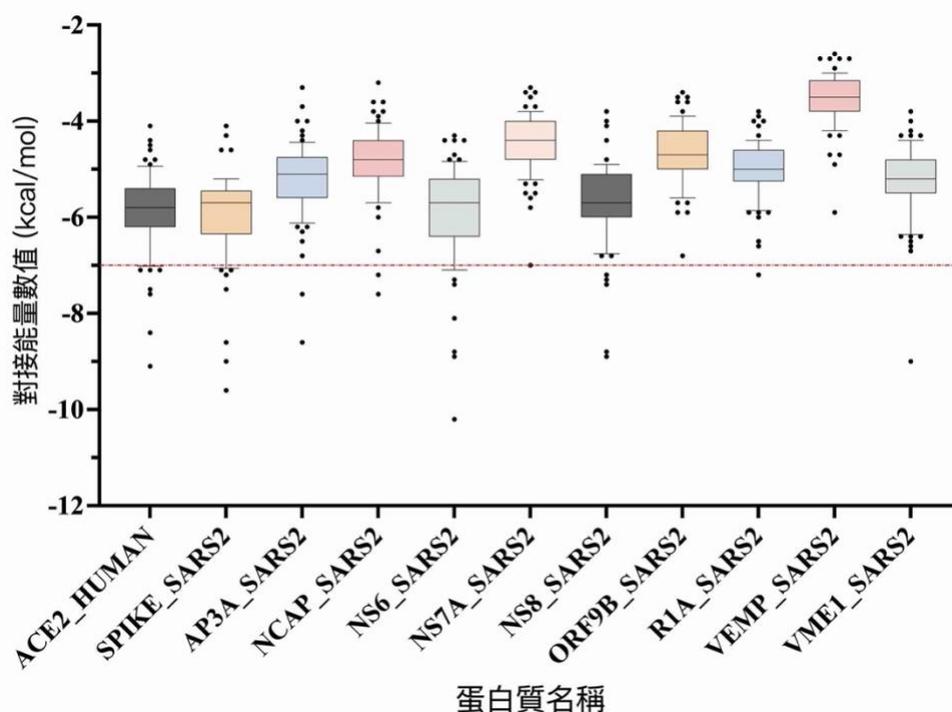


圖 7、精油化學分子與蛋白質結構分子模擬對接能量之蛋白質箱型圖。上下標線為 90 %和 10 % 對接能量資料區間，箱型區間上下範圍為 75% 和 25% 對接能量資料區間。

### 建立擴充版常見精油成分資料集

有些精油因取得不易，並非市面常見精油，例如第一階段研究預測具有高度新冠病毒防護力的潛力精油成分，源於銀杏精油與甘草精油。為進一步提高生活應用性，本研究參考精油圖鑑，選出 13 種台灣為主要產區之一（表 3 咖啡色標註）與 17 種台灣非主要產區於市面常見，共 30 種常見精油，以 Excel 整理出其所含主要化學成分及含量比例，比對實驗一，加入常見精油未被蒐集到的主要化學成分，共擴充精油成分化學分子資料數量至編號 113。編號 86 至 113 為新增的精油化學成分。（表 3）

表 3 列出常見精油中主要成分之比例，該成分含量比例越高，表示該成分對於該精油的代表性越高，例如花梨木精油含有 86% 的沉香醇，表示花梨木精油主要成分為沉香醇，也表示沉香醇的代表精油為花梨木精油，在本研究中進行分子模擬對接計算之能量數值結果，可代表花梨木精油與蛋白質的結合效果，即花梨木精油對於新冠病毒的防護力預測效果。同理，薑黃中含 60% 芳薑黃酮，為精油主要成分，可代表該精油的新冠病毒的防護力預測效果。



## 使用電腦分子模擬對接技術，預測具有新冠肺炎病毒防護力的常見精油

實驗五以台灣常見精油擴充版精油成分資料集，使用實驗三建構完成有效預測潛力精油化學成分的分離模擬對接實驗，計算對接能量數值。程式中同樣自動刪除無法進行對接的分子，結果共得到 97 種化學分子與 11 種蛋白質的對接能量數值。依據各個化學分子與 11 種蛋白質組合對接能量數值平均值，由低到高重新排序，以 Excel 整理繪製成分子對接能量數值溫度圖（附錄二）。97 個精油化學分子中獲得 64 個分子對接能量數值屬強結合性（結合親和力小於等於  $-7$  kcal/mol）的對接組合，占比最高的三種蛋白質仍然為：人體受體蛋白質 ACE2 十三組、病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 十五組和病毒蛋白 NS6\_SARS2 十四組。（圖 9）

實驗五結果共預測到 21 種潛力精油化學成分，和實驗三結果比對，新增 10 種潛力精油化學成分。這 21 種具強對接組合的潛力精油化學成分中，其中 15 種台灣常見精油（包含產區為台灣或是台灣市面上常見的精油）的精油化學分子成分，以紫色標示（圖 9），依照排序分別是 CID\_11168203 編號 100 的乙酸乳香酯（乳香精油）、CID\_10719 編號 16 的母菊藍烯（德國洋甘菊精油）、CID\_22298470 編號 12 的呋喃桉葉-1,3-二烯（沒藥精油）、CID\_117301 編號 111 沒藥醇氧化物 B（德國洋甘菊精油）、CID\_91700388 編號 101 沒藥酮氧化物 A（德國洋甘菊精油）、CID\_101731 編號 113 廣藿香烯（日本扁柏精油）、CID\_521214 編號 103 檜腦（日本扁柏精油）、CID\_10856614 編號 88  $\alpha$ -蛇床烯（花梨木精油）、CID\_2345 編號 79 苯甲酸苄酯（大花茉莉精油）、CID\_12299868 編號 40 大西洋酮（大西洋雪松精油）、CID\_441005 編號 102 杜松烯（日本扁柏精油）、CID\_92762 編號 97 的  $\alpha$ -桉葉醇（台灣紅檜精油）、CID\_3033866 編號 14 的甜沒藥烯（沒藥精油、德國洋甘菊精油）、CID\_5352496 編號 112 烯炔雙環醚（德國洋甘菊精油）、CID\_92139 編號 105 的芳薑黃烯（薑黃精油）。（圖 9）

15 種具強對接組合的台灣常見精油的化學分子成分中（圖 9 紫色標示），最穩定的結合是病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 對接編號 100 的乙酸乳香酯，能量數值  $-10.2$  kcal/mol，乙酸乳香酯對接病毒 NS6\_SARS2 能量數值  $-8.9$  kcal/mol，乙酸乳香酯對接人體受體蛋白質 ACE2 的能量數值也有  $-8.0$  kcal/mol。編號 16 母菊藍烯對接病毒 NS6\_SARS2 的能量數值  $-8.8$  kcal/mol，為第三穩定的結合。編號 12 的呋喃桉葉-1,3-二烯，對接病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 的組合，能量數值為  $-7.5$  kcal/mol，為台灣常見精油成分中具強對接組合排序第三的化學分子。（圖 9）

另外，德國洋甘菊精油含有五種具強對接組合的精油化學成分：CID\_10719 編號 16 的母菊藍烯、CID\_117301 編號 111 沒藥醇氧化物 B、CID\_91700388 編號 101 沒藥酮氧化物 A、CID\_3033866 編號 14 的甜沒藥烯及 CID\_5352496 編號 112 烯炔雙環醚。沒藥精油同時含有二

種模擬對接的能量數值具強對接組合的精油化學成分：CID\_22298470 編號 12 的呋喃桉葉-1,3-二烯和 CID\_3033866 編號 14 的甜沒藥烯。日本扁柏精油是台灣為主要產區之一的精油，含有三種成分具強對接組合的精油化學成分：CID\_101731 編號 113 廣藿香烯、CID\_521214 編號 103 檜腦及 CID\_441005 編號 102 杜松烯。因此也都是非常值得深入研究的新冠肺炎病毒防護精油。（圖 9）

本研究結果發現 30 種台灣常見精油中的乳香、德國洋甘菊、沒藥、日本扁柏、花梨木、大花茉莉、大西洋雪松、台灣紅檜、和薑黃精油，是具有相當潛力的新冠肺炎病毒防護精油。（圖 9）

研究最後以 PyMOL 軟體繪製對接三度空間結構圖，可將精油化學分子與蛋白質結構分子對接模擬計算後的數值，以視覺圖像化呈現所預測到的對接位置。（圖 10）

| 編碼 | 化學名 | 代表精油          | 化學分類             | ACE2_HUMAN | SPIKE_SARS2 | AP3A_SARS2 | NCAP_SARS2 | NS6_SARS2 | NS7A_SARS2 | NS8_SARS2 | ORF9_B_SARS2 | R1A_SARS2 | VEMP_SARS2 | VME1_SARS2 | 化學結構 | 英文化學名  | CID                    | 最小值          | 平均值   |      |
|----|-----|---------------|------------------|------------|-------------|------------|------------|-----------|------------|-----------|--------------|-----------|------------|------------|------|--|------------------------|--------------|-------|------|
| 1  | 73  | 甘草次酸          | 甘草               | 酸          | -9.1        | -9.6       | -8.6       | -7.6      | -8.9       | -7.0      | -8.9         | -6.8      | -7.2       | -5.9       | -9.0 |    | Enoxolone              | CID_10114    | -9.6  | -8.1 |
| 2  | 100 | 乙酸乳香酯         | 乳香               | 酯          | -8.0        | -10.2      | -7.1       | -7.6      | -8.9       | -5.8      | -8.0         | -6.2      | -6.8       | -5.0       | -7.1 |    | Boswellic acid acetate | CID_11168203 | -10.2 | -7.3 |
| 3  | 77  | 銀杏內酯          | 銀杏               | 酯          | -8.4        | -9.0       | -6.8       | -7.2      | -10.2      | -5.5      | -8.8         | -5.9      | -6.6       | -4.2       | -6.7 |    | Ginkgolide B           | CID_6324617  | -10.2 | -7.2 |
| 4  | 56  | 粉背蕨烯二醇        | 深山粉背蕨            | 醇          | -7.6        | -8.6       | -7.6       | -6.7      | -8.1       | -5.6      | -7.4         | -5.7      | -6.5       | -4.7       | -6.4 |    | Cheilanthenediol       | CID_90658392 | -8.6  | -6.8 |
| 5  | 16  | 母菊藍烯          | 德國洋甘菊            | 烯          | -7.1        | -6.6       | -6.2       | -5.7      | -8.8       | -5.8      | -6.8         | -5.6      | -5.6       | -4.9       | -6.3 |    | Chamazulene            | CID_10719    | -8.8  | -6.3 |
| 6  | 12  | 呋喃按葉-1,3-二烯   | 沒藥               | 烯          | -7.1        | -7.5       | -6.5       | -6.0      | -7.0       | -5.3      | -7.3         | -5.9      | -5.9       | -4.3       | -6.3 |    | Furanoedesma 1,3-Diene | CID_22298470 | -7.5  | -6.3 |
| 7  | 22  | 維生素A          | 胡蘿蔔              | 烯          | -7.5        | -7.0       | -6.2       | -5.6      | -7.1       | -5.5      | -7.2         | -5.4      | -5.9       | -4.7       | -6.4 |    | Vitamin A              | CID_445354   | -7.5  | -6.2 |
| 8  | 111 | 沒藥醇氧化物B       | 德國洋甘菊            | 氧化物        | -7.3        | -7.1       | -6.5       | -6.1      | -7.1       | -5.5      | -7.3         | -5.4      | -5.7       | -4.0       | -6.4 |    | Bisabolol oxide B      | CID_117301   | -7.3  | -6.2 |
| 9  | 101 | 沒藥酮氧化物A       | 德國洋甘菊            | 氧化物        | -7.1        | -7.1       | -6.3       | -5.4      | -6.7       | -4.7      | -7.4         | -5.7      | -6.3       | -4.1       | -6.3 |    | Bisabolone oxide A     | CID_91700388 | -7.4  | -6.1 |
| 10 | 113 | 廣藿香烯          | 日本扁柏             | 烯          | -7.3        | -7.3       | -6.5       | -5.6      | -6.3       | -4.7      | -6.6         | -6.4      | -5.1       | -4.6       | -6.4 |    | Patchoulene            | CID_101731   | -7.3  | -6.1 |
| 11 | 103 | 檜腦            | 日本扁柏             | 烯          | -7.4        | -6.6       | -5.7       | -5.8      | -7.2       | -5.3      | -6.9         | -5.9      | -5.2       | -4.4       | -5.8 |    | juniper camphor        | CID_521214   | -7.4  | -6.0 |
| 12 | 88  | α-蛇床烯         | 花梨木              | 烯          | -7.2        | -7.0       | -6.3       | -5.8      | -6.1       | -5.1      | -6.9         | -5.7      | -4.9       | -4.3       | -6.7 |    | alpha-Selinene         | CID_10856614 | -7.2  | -6.0 |
| 13 | 79  | 苯甲酸苄酯         | 大花茉莉             | 酯          | -7.1        | -7.0       | -6.0       | -5.3      | -7.1       | -5.1      | -6.2         | -5.2      | -6.0       | -4.1       | -6.5 |    | Benzyl Benzoate        | CID_2345     | -7.1  | -6.0 |
| 14 | 40  | 大西洋酮          | 大西洋雪松、喜馬拉雅雪松、鬱金香 | 酮          | -6.9        | -7.0       | -6.3       | -5.8      | -7.3       | -4.8      | -6.7         | -5.0      | -5.9       | -3.8       | -5.7 |    | alpha-Atlantone        | CID_12299868 | -7.3  | -5.9 |
| 15 | 102 | 杜松烯           | 日本扁柏             | 烯          | -6.6        | -6.4       | -6.6       | -5.8      | -6.4       | -5.1      | -7.1         | -5.7      | -5.3       | -4.1       | -5.8 |  | delta-Cadinene         | CID_441005   | -7.1  | -5.9 |
| 16 | 97  | α-按葉醇         | 台灣紅檜             | 醇          | -6.7        | -6.7       | -6.0       | -5.8      | -6.3       | -5.2      | -7.4         | -5.5      | -5.5       | -3.8       | -5.7 |  | α-Eudesmol             | CID_92762    | -7.4  | -5.9 |
| 17 | 14  | 甜沒藥烯          | 沒藥、薑、德國洋甘菊、黑胡椒   | 烯          | -6.9        | -7.1       | -5.6       | -5.4      | -7.4       | -4.9      | -6.5         | -4.7      | -5.4       | -4.2       | -6.1 |  | (Z)-gamma-bisabolene   | CID_3033866  | -7.4  | -5.8 |
| 18 | 96  | 喜馬雪松醇         | 大西洋雪松            | 醇          | -6.3        | -6.7       | -5.9       | -5.6      | -6.7       | -4.8      | -6.9         | -5.6      | -5.0       | -4.4       | -6.0 |  | cedrol                 | CID_65575    | -6.9  | -5.8 |
| 19 | 112 | 烯炔雙環醚         | 德國洋甘菊            | 醚          | -6.7        | -6.7       | -5.9       | -5.2      | -7.1       | -5.0      | -6.4         | -4.7      | -6.0       | -3.8       | -6.2 |  | (E)-En-yn-dicycloether | CID_5352496  | -7.1  | -5.8 |
| 20 | 41  | 纈草酮           | 穗日松、纈草           | 酮          | -6.3        | -7.1       | -5.8       | -5.2      | -6.3       | -4.9      | -6.7         | -5.6      | -4.9       | -4.0       | -6.6 |  | Valeranone             | CID_171455   | -7.1  | -5.8 |
| 21 | 50  | 甜沒藥醇          | 德國洋甘菊            | 醇          | -6.5        | -6.9       | -5.8       | -5.0      | -6.5       | -4.9      | -6.8         | -5.0      | -5.7       | -4.3       | -6.0 |  | alpha-bisabolol        | CID_442343   | -6.9  | -5.8 |
| 22 | 62  | 纈草醛           | 甘松、纈草            | 醛          | -6.5        | -6.5       | -6.0       | -5.4      | -6.8       | -4.7      | -6.7         | -5.6      | -5.1       | -4.1       | -5.9 |  | Valerenal              | CID_6440942  | -6.8  | -5.8 |
| 23 | 105 | 芳薑黃烯          | 薑黃               | 烯          | -6.8        | -6.8       | -5.8       | -5.5      | -7.1       | -4.9      | -6.3         | -4.7      | -5.1       | -4.1       | -6.2 |  | ar-Curcumene           | CID_92139    | -7.1  | -5.8 |
| 24 | 93  | 芳薑黃酮          | 薑黃               | 酮          | -6.5        | -6.8       | -5.9       | -5.4      | -6.7       | -5.0      | -6.3         | -5.1      | -5.0       | -4.1       | -6.1 |  | ar-tumerone            | CID_558221   | -6.8  | -5.7 |
| 25 | 54  | 廣藿香醇          | 廣藿香              | 醇          | -6.4        | -6.4       | -5.6       | -5.2      | -6.6       | -4.7      | -6.6         | -5.7      | -4.8       | -4.2       | -6.4 |  | patchouli alcohol      | CID_10955174 | -6.6  | -5.7 |
| 26 | 51  | 檀香醇           | 檀香木              | 醇          | -6.5        | -7.2       | -6.0       | -5.2      | -5.9       | -4.9      | -6.5         | -5.2      | -5.1       | -3.8       | -5.5 |  | alpha-santalol         | CID_11085337 | -7.2  | -5.6 |
| 27 | 49  | 檜木醇           | 檜木               | 醇          | -6.4        | -5.9       | -5.4       | -5.7      | -6.8       | -5.3      | -6.0         | -4.9      | -5.8       | -3.7       | -5.6 |  | Hinokitiol             | CID_3611     | -6.8  | -5.6 |
| 28 | 21  | 莪術烯           | 沒藥               | 烯          | -6.1        | -6.5       | -5.9       | -5.2      | -6.1       | -5.1      | -6.4         | -5.4      | -5.2       | -3.7       | -5.5 |  | Curzerene              | CID_12305301 | -6.5  | -5.6 |
| 29 | 3   | 茵陳烯炔          | 茵陳               | 烯          | -6.4        | -6.1       | -5.1       | -5.1      | -6.7       | -4.7      | -5.8         | -4.8      | -5.3       | -4.2       | -6.2 |  | Capillene              | CID_3083613  | -6.7  | -5.5 |
| 30 | 37  | β-突厥酮 / 大馬士革酮 | 玫瑰               | 酮          | -5.9        | -6.5       | -5.9       | -5.0      | -5.9       | -4.9      | -6.2         | -4.9      | -5.2       | -3.8       | -5.7 |  | damascenone            | CID_5366074  | -6.5  | -5.4 |

圖 9、實驗五分子模擬對接能量平均值排序前 20 名擴充版精油成分二度空間溫度表。顏色越深的組合代表該精油化學分子與蛋白質結合能力越佳。顯著標示分子間強結合性組合。（分子對接溫度圖總表於附錄二）

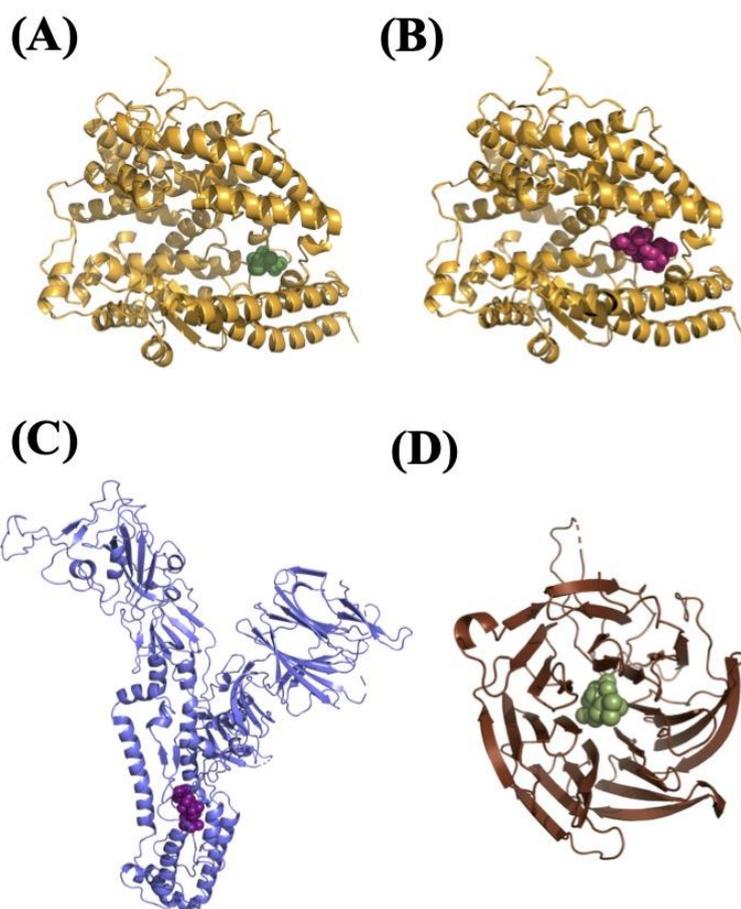


圖 10、使用 PyMOL 三度空間結構繪圖軟體繪製 (A) 人類受體蛋白質 ACE2 與日本扁柏的檜腦對接三度空間結構圖，能量數值  $-7.4 \text{ kcal/mol}$ 。(B) 人類受體蛋白質 ACE2 與乳香的乙酸乳香酯對接三度空間結構圖，能量數值  $-8.0 \text{ kcal/mol}$ 。(C) 冠狀病毒棘蛋白與乳香的乙酸乳香酯對接三度空間結構圖，能量數值  $-10.2 \text{ kcal/mol}$ 。(D) 冠狀病毒 NS6 附屬非重疊轉譯區 ORF6 蛋白與銀杏的銀杏內酯對接三度空間結構圖，能量數值  $-10.2 \text{ kcal/mol}$ 。

## 伍、討論

一、 探討電腦分子模擬對接技術預測成效，篩選具新冠病毒防護力的潛力精油成分。

(一) 家中常見精油種類繁多，內含成分也各有不同，在精油圖鑑中有大約 700 種天然化合物分子，因此依據不同的有機官能基類別，選擇烯、醚、酮、醇、醛、酸、酚、酯類及氧化物中的並按已知數量比例選擇各類代表精油成分分子。為減少各類的疏漏偏頗，烯類分子多選得多，酸類分子少選得較少。然而，研究成果也令我們興奮，雖然酸類僅選到非常見甘草精油的甘草次酸，卻得到對接預測結果是穩定的組合。本研究以電腦自動化巢狀迴圈程式結合分子模擬對接計算，能處理大量數值且預測較多可能組合，是很有效率又科學的做法。

(二) 本次研究受限於分子模擬對接技術，需具備有完整的三度空間結構資訊，因此僅以十一種已知三度空間結構之蛋白質作為目標蛋白質。這次研究藉由國際蛋白質資料庫(UniProt)篩選出十個已知具有三度空間結構之新冠肺炎病毒蛋白質及一種新冠病毒主要受體人類受體蛋白質 ACE2，並經由國際蛋白質結構資料庫 (RCSB PDB)下載這些蛋白質的三度空間結構，但根據其他相關的學術研究，有一些蛋白質沒有發表三度空間結構可供分子對接模擬實驗使用，所以這也是這次實驗的限制。但由於現在人工智慧蛋白質結構模擬器的發展，如 Alphafold (保羅林肯, 2021)，可提供未知結構的蛋白質之模擬三度空間結構，優化本研究所建立的篩選模式，找到更多潛力的精油成分。

(三) 第一階段研究結果中，因為重複的化學分子已被去除，且無法進行對接的分子也被自動刪除，因此得到 73 種化學分子的對接能量數值。第一階段研究結果能量溫度圖中，篩選到 38 個分子間強結合性組合，預測到 11 種可供深入研究價值的精油成分。這藉由大量精油分子對接實驗中另發現人體受體蛋白質 ACE2、病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 和病毒蛋白 NS6\_SARS2 三種蛋白質，與精油成分化學分子具明顯強結合性對接效能。

(四) 平均值排序的前五名精油成分中有四種已有發表的相關研究，驗證本研究方法達 80% 預測效能，顯示這次的研究所建立的篩選模式具深入研究價值，因此推論本次研究為有效預測潛力新冠病毒防護精油的方法。若擴大應用於更多精油成分化學分子或更多目標蛋白質，將有機會找到更多有潛力的精油成分。

二、運用前一個研究目的所得的有效的分子模擬對接技術預測方法，找出台灣常見精油中，具新冠病毒防護力的潛力精油。

(一) 第一階段研究結果得知，這是一個有效率的方式找出有潛力的新冠病毒防護精油，為了增加生活應用性，參考圖鑑後，選出 30 種台灣常見精油，比對實驗一加入未被蒐集到的化學成分，共擴充精油成分化學分子數量至編號 113，擴充版精油成分資料集，將可能找出更多潛力精油。

(二) 這次的分子模擬對接計算將化學分子與蛋白質結合單一化，但實際上很可能發生多個精油化學分子或是多種精油化學分子同時結合在同一個蛋白質上，稱之為多位點受質分子結合。未來分子模擬對接技術於多位點受質分子結合有廣泛研究後，本研究有機會進行優化。

(三) 其他研究發現新型冠狀病毒 (COVID-19) 入侵人體宿主細胞的路徑，除了受體蛋白質 ACE2，另一受體蛋白 TMPRSS2 絲胺酸蛋白酶也可能扮演關鍵角色。所以未來可以收集更多蛋白質或精油成分，進行電腦組合對接計算，期待可以找到更多有趣的結果。

(四) 針對人體受體蛋白質 ACE2、病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 與精油分子具強結合性對接的組合，可能改變的是病毒棘蛋白或人體受體蛋白質結合的狀態，進而影響病毒傳播進入細胞，

其所預測出具新冠病毒防護力的潛力精油，可能在後疫情時代可作為生活防疫方式的參考。病毒蛋白 NS6\_SARS2 為病毒內部蛋白，防護效果需要更多層面的研究。

(五) 以 PyMOL 繪製精油成分化學分子與病毒蛋白質分子結構對接 3D 模擬圖，可以提供具有深入研究潛力的精油分子與蛋白質結合情況，未來若配合 3D 成像投影技術或是 VR 技術，將可使實驗結果更直接的呈現眼前。

## 陸、結論

此科展研究以精油成分化學分子結構與現有已知結構之新冠病毒相關之目標蛋白質結構，結合 Python 巢狀迴圈，自動化大量進行精油成分化學分子與目標蛋白質的 AutoDock Vina 分子模擬對接實驗。因對接能量數值愈低，代表結合能力越好，分子間的結合愈穩定，可能改變病毒棘蛋白或人體受體蛋白質結合的功能狀態，進而影響病毒傳播進入細胞，或是影響病毒生理功能或複製。藉由預測精油成分化學分子與病毒相關之蛋白質間愈穩定的結合，預測出具新冠病毒防護力的精油。

第一階段研究結果得到 73 個精油成分化學分子與 11 種蛋白對接組合之能量數值，繪製而成的能量溫度圖中，獲得 38 個分子間強結合性組合，即結合親和力小於等於  $-7$  kcal/mol 的對接組合，預測出 11 種具新冠病毒防護力的精油化學成分；或者說預測到人體受體蛋白質 ACE2、病毒棘蛋白 SPIKE\_SARS2 和病毒蛋白 NS6\_SARS2 三種蛋白質，與精油成分化學分子具明顯強結合性對接效能。

對接能量數值平均值前五名精油化學成分，編號 73 的甘草次酸、編號 77 的銀杏內酯、編號 56 的粉背蕨烯二醇、編號 16 烯類的母菊藍烯，和編號 12 的呋喃桉-1,3-二烯，此五項精油成分分子已有與病毒或新冠病毒相關的學術研究者，有甘草次酸 (葛孚晶 等人, 2021)、銀杏內酯 (劉新娟 等人, 2020)、德國洋甘菊精油的母菊藍烯 (精油大百科, 2021; Silva 等人, 2020)與沒藥精油的呋喃桉葉-1,3-二烯 (Alyafei, 2020)，相當於 80%預測效能。顯示這次的研究所建立的篩選模式具深入研究價值，本研究以電腦自動化程式結合分子模擬對接計算，能處理大量數值且預測較多可能組合，因此本次科展研究為有效預測潛力新冠病毒防護精油的方法。

本研究也進一步篩選精油圖鑑中台灣常見精油之化學成分，依照本研究所建立的篩選模式，探討精油成分化學分子結構與現有已知結構之新冠病毒相關之目標蛋白質結構對接效能，最後預測出台灣市面常見精油中乳香精油、德國洋甘菊精油、沒藥精油、花梨木精油、大西

洋雪松精油，以及台灣為產區中日本扁柏精油、大花茉莉精油、台灣紅檜精油、和薑黃精油，是具有潛力的新冠肺炎病毒防護精油。

## 柒、未來展望

目前流行的百年大疫—新冠肺炎，此科展研究中針對 COVID-19 病毒，篩選部分精油成分化學分子及已知三度空間結構蛋白質作為實驗對象，精油圖鑑中還有許多的精油化學成分未被列入實驗資料集中，未來可增加精油化學成分或目標蛋白質資料集數量，或者使用人工智慧蛋白質結構模擬工具，如 Alphafold (保羅林肯, 2021)，提供未知結構蛋白質的模擬三度空間結構資料，優化及延伸本研究所建立的篩選模式，找到更多潛力防護的精油。這次科展研究中尋找到的最佳潛力防護精油，在後疫情防疫之生活應用也具有高度價值。這些精油篩選模式也可應用於世上許多令人聞風變色的病毒防治。

## 捌、參考文獻資料

- 王翰霖, 林義傑, & 溫英華. (2014). 由基因序列的親疏設計流感疫苗探討. *2014 年臺灣國際科學展覽會, 優勝作品專輯*.
- 全華圖書. (國一上). 第一冊 第二章 演算法與程式設計、第四章 資訊應用專題. *資訊科技*.
- 保羅林肯. (2021). 人工智能破解蛋白質結構可能引發醫學革命. *BBC 新聞網科學事務*, <https://www.bbc.com/zhongwen/trad/57969896>.
- 南一版. (國一下). 單元二 傳染病情報站、打擊傳染病. *健康與體育*
- 徐尚德. (2022). 解析棘蛋白結構——新冠病毒變異株如何增強傳染力，巧妙躲避免疫系統？. *中央研究院-研之有物*.
- 康軒版. (國二上). 第六章 探索物質組成. *理化*.
- 溫佑君. (2018). 新精油圖鑑 300 種精油科研新知集成. *商周出版, 初版*.
- 葛孚晶, 曾晨鳴, 嚴芳潔, 錢美佳, 王偉華, 羅沛華, 翁勤潔, 莊讓笑, 席建軍, 黃勁松, 楊波, 朱虹, & 何尙軍. (2021). 甘草酸：一種治療新型冠狀肺炎的潛在藥物. *藥學學報*, *56*, 1211-1216.
- 精油大百科. (2021). 德國洋甘菊/藍母菊精華的化學成分及功效研究. *知乎專欄*.
- 維基百科. (2020). 分子對接 (macromolecular docking). *維基媒體基金會：維基百科, 自由的百科全書*, <https://zh.wikipedia.org/zh-tw/%E5%88%86%E5%AD%90%E5%AF%B9%E6%8E%A5>.
- 劉新娟, 江美芳, 俞婷, 王丹丹, 朱國琴, & 高崎. (2020). 基於 LC-MS 和網絡藥理學探討銀杏酮酯治療合併心血管疾病的新型冠狀病毒肺炎的研究. *中成藥*, *09*, 2481-2488.

- 衛生福利部疾病管制署. (2020). 第五類法定傳染病疾病介紹. 嚴重特殊傳染性肺炎, <https://www.cdc.gov.tw/Category/Page/vleOMKqwuEblMgqaTeXG8A>.
- 衛生福利部疾病管制署. (2021). Q1.2 COVID-19 疫苗的作用原理是什麼? . <https://www.cdc.gov.tw/Category/QAPage/0mRrri9JyeXhLq393QUakw>.
- 翰林版. (國一下). 第三章 生物的演化與分類. 自然.
- Alyafei, N. (2020). Can Myrrh Combat COVID-19? *Iberoam J Med*, 2, 223-229. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.5281/zenodo.3830386>
- Eberhardt, J., Santos-Martins, D., Tillack, A. F., & Forli, S. (2021). AutoDock Vina 1.2.0: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings. *J Chem Inf Model*, 61(8), 3891-3898. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00203>
- Silva, J., Figueiredo, P. L. B., Byler, K. G., & Setzer, W. N. (2020). Essential Oils as Antiviral Agents. Potential of Essential Oils to Treat SARS-CoV-2 Infection: An In-Silico Investigation. *Int J Mol Sci*, 21(10). <https://doi.org/10.3390/ijms21103426>

附錄一、實驗三精油成分分子模擬對接能量二維溫度表。(第一頁)

| 編碼 | 化學名 | 代表精油          | 化學分類                     | ACE2_HUMAN | SPIKE_SARS2 | AP3A_SARS2 | NCAP_SARS2 | NS6_SARS2 | NS7A_SARS2 | NS8_SARS2 | ORF9B_SARS2 | R1A_SARS2 | VEMP_SARS2 | VME1_SARS2 | 化學結構 | 英文化學名                   | CID          | 最小值   | 平均值  |
|----|-----|---------------|--------------------------|------------|-------------|------------|------------|-----------|------------|-----------|-------------|-----------|------------|------------|------|-------------------------|--------------|-------|------|
| 1  | 73  | 甘草次酸          | 甘草                       | 酸          | -9.1        | -9.6       | -8.6       | -7.6      | -8.9       | -7.0      | -8.9        | -6.8      | -7.2       | -5.9       | -9.0 | Enoxolone               | CID_10114    | -9.6  | -8.1 |
| 2  | 77  | 銀杏內酯          | 銀杏                       | 酯          | -8.4        | -9.0       | -6.8       | -7.2      | -10.2      | -5.5      | -8.8        | -5.9      | -6.6       | -4.2       | -6.7 | Ginkgolide B            | CID_6324617  | -10.2 | -7.2 |
| 3  | 56  | 粉背蕨烯二醇        | 深山粉背蕨                    | 醇          | -7.6        | -8.6       | -7.6       | -6.7      | -8.1       | -5.6      | -7.4        | -5.7      | -6.5       | -4.7       | -6.4 | Cheilanthenediol        | CID_90658392 | -8.6  | -6.8 |
| 4  | 16  | 母菊藍烯          | 德國洋甘菊                    | 烯          | -7.1        | -6.6       | -6.2       | -5.7      | -8.8       | -5.8      | -6.8        | -5.6      | -5.6       | -4.9       | -6.3 | Chamazulene             | CID_10719    | -8.8  | -6.3 |
| 5  | 12  | 咪喃按葉-1,3-二烯   | 沒藥                       | 烯          | -7.1        | -7.5       | -6.5       | -6.0      | -7.0       | -5.3      | -7.3        | -5.9      | -5.9       | -4.3       | -6.3 | Furanouedema 1,3-Diene  | CID_22298470 | -7.5  | -6.3 |
| 6  | 22  | 維生素A          | 胡蘿蔔                      | 烯          | -7.5        | -7.0       | -6.2       | -5.6      | -7.1       | -5.5      | -7.2        | -5.4      | -5.9       | -4.7       | -6.4 | Vitamin A               | CID_445354   | -7.5  | -6.2 |
| 7  | 79  | 苯甲酸苄酯         | 大花茉莉                     | 酯          | -7.1        | -7.0       | -6.0       | -5.3      | -7.1       | -5.1      | -6.2        | -5.2      | -6.0       | -4.1       | -6.5 | Benzyl Benzoate         | CID_2345     | -7.1  | -6.0 |
| 8  | 40  | 大西洋酮          | 大西洋雪松、喜馬拉雅雪松、響金響         | 酮          | -6.9        | -7.0       | -6.3       | -5.8      | -7.3       | -4.8      | -6.7        | -5.0      | -5.9       | -3.8       | -5.7 | alpha-Atlantone         | CID_12299868 | -7.3  | -5.9 |
| 9  | 14  | 甜沒藥烯          | 沒藥、薑、德國洋甘菊、黑胡椒           | 烯          | -6.9        | -7.1       | -5.6       | -5.4      | -7.4       | -4.9      | -6.5        | -4.7      | -5.4       | -4.2       | -6.1 | (Z)-gamma-bisabolene    | CID_3033866  | -7.4  | -5.8 |
| 10 | 41  | 纈草酮           | 穗甘松、纈草                   | 酮          | -6.3        | -7.1       | -5.8       | -5.2      | -6.3       | -4.9      | -6.7        | -5.6      | -4.9       | -4.0       | -6.6 | Valeranone              | CID_171455   | -7.1  | -5.8 |
| 11 | 50  | 甜沒藥醇          | 德國洋甘菊                    | 醇          | -6.5        | -6.9       | -5.8       | -5.0      | -6.5       | -4.9      | -6.8        | -5.0      | -5.7       | -4.3       | -6.0 | alpha-bisabolol         | CID_442343   | -6.9  | -5.8 |
| 12 | 62  | 纈草醛           | 甘松、纈草                    | 醛          | -6.5        | -6.5       | -6.0       | -5.4      | -6.8       | -4.7      | -6.7        | -5.6      | -5.1       | -4.1       | -5.9 | Valerenal               | CID_6440942  | -6.8  | -5.8 |
| 13 | 54  | 廣藿香醇          | 廣藿香                      | 醇          | -6.4        | -6.4       | -5.6       | -5.2      | -6.6       | -4.7      | -6.6        | -5.7      | -4.8       | -4.2       | -6.4 | patchouli alcohol       | CID_10955174 | -6.6  | -5.7 |
| 14 | 51  | 檀香醇           | 檀香木                      | 醇          | -6.5        | -7.2       | -6.0       | -5.2      | -5.9       | -4.9      | -6.5        | -5.2      | -5.1       | -3.8       | -5.5 | alpha-santalol          | CID_11085337 | -7.2  | -5.6 |
| 15 | 49  | 檜木醇           | 檜木                       | 醇          | -6.4        | -5.9       | -5.4       | -5.7      | -6.8       | -5.3      | -6.0        | -4.9      | -5.8       | -3.7       | -5.6 | Hinokitiol              | CID_3611     | -6.8  | -5.6 |
| 16 | 21  | 莪朮烯           | 沒藥                       | 烯          | -6.1        | -6.5       | -5.9       | -5.2      | -6.1       | -5.1      | -6.4        | -5.4      | -5.2       | -3.7       | -5.5 | Curzerene               | CID_12305301 | -6.5  | -5.6 |
| 17 | 3   | 茵陳烯炔          | 茵陳                       | 烯          | -6.4        | -6.1       | -5.1       | -5.1      | -6.7       | -4.7      | -5.8        | -4.8      | -5.3       | -4.2       | -6.2 | Capillene               | CID_3083613  | -6.7  | -5.5 |
| 18 | 37  | β-突厥酮 / 大馬士革酮 | 玫瑰                       | 酮          | -5.9        | -6.5       | -5.9       | -5.0      | -5.9       | -4.9      | -6.2        | -4.9      | -5.2       | -3.8       | -5.7 | damascenone             | CID_5366074  | -6.5  | -5.4 |
| 19 | 52  | 金合歡醇          | 玫瑰、依蘭                    | 醇          | -6.2        | -6.0       | -5.6       | -4.9      | -6.2       | -4.8      | -6.0        | -4.7      | -5.7       | -3.4       | -5.5 | farnesol                | CID_445070   | -6.2  | -5.4 |
| 20 | 75  | 香薷芥酚          | 野馬鬱蘭                     | 酚          | -6.0        | -5.7       | -4.8       | -5.7      | -6.4       | -4.7      | -6.0        | -5.1      | -5.4       | -3.6       | -5.5 | Carvacrol               | CID_10364    | -6.4  | -5.4 |
| 21 | 39  | 紫羅蘭酮          | 馬尾草、紫羅蘭、桂花、紅花梔子、穗甘松      | 酮          | -6.2        | -6.2       | -5.6       | -4.8      | -5.9       | -4.7      | -6.2        | -4.6      | -5.1       | -3.9       | -5.5 | 3-Oxo-alpha-ionone      | CID_5363685  | -6.2  | -5.3 |
| 22 | 46  | 松油醇 / 萜品醇     | 樟樹、松木、尤加利、茶樹、食茱萸         | 醇          | -6.0        | -6.3       | -5.2       | -5.1      | -6.2       | -4.7      | -6.0        | -4.7      | -5.1       | -3.5       | -5.5 | Alpha-Terpineol         | CID_17100    | -6.3  | -5.3 |
| 23 | 63  | 金合歡醛          | 香茅、馬鞭草                   | 醛          | -6.3        | -6.1       | -5.5       | -4.5      | -6.5       | -4.8      | -5.8        | -4.3      | -4.8       | -4.0       | -5.3 | Farnesal                | CID_5280598  | -6.5  | -5.3 |
| 24 | 71  | 小茴香醛          | 孜然(小茴香)、茴香、丁香、百里香、肉桂、尤加利 | 醛          | -5.9        | -5.8       | -5.0       | -5.2      | -6.4       | -5.0      | -5.7        | -4.8      | -4.7       | -3.7       | -5.5 | 4-Isopropylbenzaldehyde | CID_326      | -6.4  | -5.2 |
| 25 | 74  | 百里香酚          | 百里酚百里香                   | 酚          | -6.2        | -5.9       | -4.7       | -5.2      | -6.6       | -4.5      | -5.8        | -4.9      | -5.1       | -3.5       | -5.3 | Thymol                  | CID_6989     | -6.6  | -5.2 |
| 26 | 13  | 金合歡烯          | 香茅、橙花、玫瑰、廣藿香、德國洋甘菊       | 烯          | -6.0        | -6.0       | -5.2       | -4.8      | -6.2       | -4.6      | -5.6        | -4.7      | -5.2       | -4.0       | -5.2 | alpha-Farnesene         | CID_5281516  | -6.2  | -5.2 |
| 27 | 7   | 萜品油烯          | 尤加利、茶樹、松脂                | 烯          | -6.2        | -5.5       | -5.1       | -4.8      | -6.1       | -4.6      | -5.8        | -4.9      | -5.3       | -3.7       | -5.5 | Terpinolene             | CID_11463    | -6.2  | -5.2 |
| 28 | 25  | 黃樟素           | 樟樹(本樟、牛樟)精油              | 醚          | -6.0        | -5.8       | -5.1       | -5.1      | -6.1       | -4.5      | -5.8        | -4.6      | -5.0       | -3.4       | -5.6 | Safrole                 | CID_5144     | -6.1  | -5.2 |
| 29 | 8   | 萜品烯           | 松樹、杜松                    | 烯          | -5.8        | -5.7       | -4.8       | -4.9      | -6.4       | -4.7      | -5.8        | -4.8      | -4.8       | -3.5       | -5.5 | gamma-Terpinene         | CID_7461     | -6.4  | -5.2 |
| 30 | 26  | 肉豆蔻醚          | 歐芹、肉豆蔻                   | 醚          | -6.0        | -5.6       | -5.6       | -4.9      | -6.1       | -4.7      | -5.6        | -4.3      | -5.2       | -3.4       | -5.1 | Myristicin              | CID_4276     | -6.1  | -5.1 |
| 31 | 36  | 胡薄荷酮          | 胡薄荷                      | 酮          | -5.7        | -6.4       | -5.4       | -4.8      | -5.2       | -4.2      | -5.7        | -4.9      | -5.5       | -3.5       | -5.2 | Pulegone                | CID_442495   | -6.4  | -5.1 |
| 32 | 35  | 左旋香芹酮 / 藏茴香酮  | 綠薄荷                      | 酮          | -5.4        | -6.1       | -5.6       | -4.7      | -5.3       | -4.3      | -5.8        | -4.6      | -5.0       | -3.6       | -5.4 | R-Carvone               | CID_439570   | -6.1  | -5.1 |
| 33 | 64  | 甜橙醛           | 甜橙、紅橘                    | 醛          | -5.9        | -5.7       | -5.1       | -4.3      | -5.8       | -4.8      | -5.9        | -4.4      | -4.9       | -3.7       | -5.2 | beta-Sinensal           | CID_5281535  | -5.9  | -5.1 |
| 34 | 34  | 右旋香芹酮 / 藏茴香酮  | 藏茴香、蒔蘿籽                  | 酮          | -5.4        | -6.1       | -5.6       | -4.7      | -5.2       | -4.2      | -5.8        | -4.6      | -5.3       | -3.6       | -5.2 | S-Carvone               | CID_16724    | -6.1  | -5.1 |
| 35 | 47  | 松油烯4醇         | 馬鬱蘭、肉豆蔻                  | 醇          | -6.1        | -6.2       | -5.4       | -4.8      | -5.2       | -4.1      | -5.5        | -4.5      | -5.2       | -3.4       | -5.0 | 4-Carvomenthenol        | CID_11230    | -6.2  | -5.0 |
| 36 | 33  | 馬鞭草酮          | 馬鞭草酮迷迭香、樟腦迷迭香            | 酮          | -5.1        | -5.7       | -5.2       | -4.6      | -5.3       | -4.1      | -5.9        | -5.1      | -5.2       | -3.3       | -5.2 | Verbenone               | CID_92874    | -5.9  | -5.0 |
| 37 | 69  | 肉桂醛           | 台灣土肉桂、錫蘭肉桂               | 醛          | -6.0        | -5.6       | -4.6       | -5.0      | -6.1       | -4.5      | -5.4        | -4.2      | -4.6       | -3.7       | -4.9 | Cinnamaldehyde          | CID_637511   | -6.1  | -5.0 |
| 38 | 29  | α-側柏酮 / 崖柏酮   | 側柏、鼠尾草、艾草                | 酮          | -5.3        | -6.5       | -5.0       | -4.3      | -5.1       | -4.3      | -5.7        | -4.9      | -4.7       | -3.3       | -5.0 | alpha-Thujone           | CID_261491   | -6.5  | -4.9 |
| 39 | 76  | 丁香酚           | 台灣土肉桂、丁香花苞、肉桂葉           | 酚          | -5.7        | -5.8       | -4.7       | -4.3      | -5.9       | -4.7      | -5.3        | -4.2      | -4.8       | -3.3       | -5.2 | Eugenol                 | CID_3314     | -5.9  | -4.9 |

附錄一、實驗三精油成分分子模擬對接能量二維溫度表。(第二頁)

| 編號 | 化學名 | 代表精油                | 化學分類                                   | ACE2_HUMAN | SPIKE_SARS2 | AP3A_SARS2 | NCAP_SARS2 | NS6_SARS2 | NS7A_SARS2 | NS8_SARS2 | ORF9B_SARS2 | R1A_SARS2 | VEMP_SARS2 | VME1_SARS2 | 化學結構 | 英文化學名   | CID                   | 最小值         | 平均值  |      |
|----|-----|---------------------|--|------------|-------------|------------|------------|-----------|------------|-----------|-------------|-----------|------------|------------|------|---|-----------------------|-------------|------|------|
| 40 | 78  | 乙酸苧酯                | 大花茉莉                                   | 酯          | -5.8        | -5.5       | -4.9       | -5.0      | -5.7       | -4.2      | -5.1        | -4.2      | -5.1       | -3.4       | -4.9 |    | Benzyl acetate        | CID_8785    | -5.8 | -4.9 |
| 41 | 32  | 薄荷酮                 | 綠薄荷、胡椒薄荷                               | 酮          | -5.6        | -5.7       | -4.8       | -4.4      | -5.0       | -4.0      | -5.7        | -4.7      | -5.2       | -3.2       | -5.4 |    | Menthone              | CID_26447   | -5.7 | -4.9 |
| 42 | 6   | 右旋檸檬烯               | 柑橘類、松葉、薄荷                              | 烯          | -5.4        | -5.7       | -5.1       | -4.8      | -5.0       | -4.1      | -5.4        | -4.7      | -5.0       | -3.5       | -4.9 |    | D-Limonene            | CID_440917  | -5.7 | -4.9 |
| 43 | 27  | 芹菜醛                 | 歐芹精油                                   | 醛          | -6.0        | -5.4       | -5.3       | -4.8      | -5.7       | -4.4      | -5.4        | -3.9      | -4.8       | -3.1       | -4.8 |    | Apiole                | CID_10659   | -6.0 | -4.9 |
| 44 | 28  | 玫瑰醛                 | 玫瑰                                     | 醛          | -5.7        | -5.9       | -5.1       | -4.4      | -5.3       | -4.0      | -5.5        | -4.7      | -4.6       | -3.3       | -5.0 |    | Rose oxide            | CID_7093102 | -5.9 | -4.9 |
| 45 | 20  | α-側柏烯               | 乳香                                     | 烯          | -5.7        | -5.7       | -4.9       | -4.8      | -4.9       | -4.2      | -5.5        | -5.1      | -4.4       | -3.3       | -5.0 |    | alpha-Thujene         | CID_17868   | -5.7 | -4.9 |
| 46 | 24  | 細辛醛                 | 菖蒲精油                                   | 醛          | -6.1        | -5.2       | -5.1       | -4.6      | -6.0       | -4.4      | -5.3        | -3.9      | -4.7       | -3.3       | -4.7 |    | Asarone               | CID_636822  | -6.1 | -4.8 |
| 47 | 19  | α-松油醇 / 派烯 / 松油     | 檸檬草、迷迭香、藍膠尤加利、橙花、乳香、黑胡椒、橙花、白芷、杜松、松、白茅膏 | 烯          | -4.8        | -6.0       | -5.1       | -4.3      | -4.9       | -4.0      | -5.6        | -4.9      | -4.8       | -3.5       | -5.2 |    | alpha-Pinene          | CID_6654    | -6.0 | -4.8 |
| 48 | 45  | 薄荷醇                 | 薄荷                                     | 醇          | -6.1        | -5.7       | -5.1       | -4.3      | -5.2       | -3.8      | -5.3        | -5.0      | -4.4       | -3.1       | -5.1 |    | l-Menthol             | CID_16666   | -6.1 | -4.8 |
| 49 | 30  | β-側柏酮 / 崖柏酮         | 南木蒿                                    | 酮          | -5.9        | -5.7       | -5.0       | -4.4      | -4.8       | -3.7      | -5.7        | -4.8      | -4.7       | -3.2       | -4.9 |    | beta-Thujone          | CID_91456   | -5.9 | -4.8 |
| 50 | 57  | 1,8-桉油醇 / 桉葉油素      | 月桃、迷迭香、綠花白千層、茶樹、薑黃、澳洲尤加利、食茱萸           | 醇          | -5.1        | -5.5       | -5.0       | -4.4      | -4.9       | -3.8      | -5.9        | -4.8      | -5.0       | -3.4       | -4.9 |    | Eucalyptol            | CID_2758    | -5.9 | -4.8 |
| 51 | 72  | 香草醛                 | 香草、安息香、秘魯香脂                            | 醛          | -5.8        | -5.6       | -4.7       | -4.7      | -5.7       | -4.4      | -5.0        | -3.8      | -5.3       | -3.0       | -4.6 |    | Vanillin              | CID_1183    | -5.8 | -4.8 |
| 52 | 59  | 檸檬香茅 / 檸檬醛 α / 檸檬香茅 | 檸檬香茅、山雞椒、山雞椒                           | 醛          | -5.3        | -5.4       | -4.6       | -4.6      | -5.7       | -4.4      | -5.0        | -4.5      | -4.9       | -3.1       | -5.0 |    | Neral                 | CID_643779  | -5.7 | -4.8 |
| 53 | 31  | 樟腦 / 龍腦酮            | 樟樹、芳樟、薰衣草、樟腦迷迭香                        | 酮          | -4.9        | -5.4       | -5.2       | -4.6      | -5.0       | -4.0      | -5.8        | -4.8      | -4.4       | -3.4       | -4.9 |  | Camphor               | CID_159055  | -5.8 | -4.8 |
| 54 | 5   | 羅勒烯                 | 羅勒、紫蘇                                  | 烯          | -5.6        | -5.4       | -4.6       | -4.4      | -5.7       | -4.0      | -5.0        | -4.4      | -4.5       | -3.6       | -5.1 |  | beta-Ocimene          | CID_5281553 | -5.7 | -4.8 |
| 55 | 82  | 咖啡因                 | 咖啡                                     | 氧化物        | -5.3        | -5.9       | -4.9       | -4.9      | -6.0       | -4.2      | -5.0        | -3.9      | -5.1       | -2.7       | -4.3 |  | Caffeine              | CID_2519    | -6.0 | -4.7 |
| 56 | 2   | 樟烯                  | 樟、柏、香茅                                 | 烯          | -4.8        | -5.5       | -4.9       | -4.2      | -4.9       | -3.7      | -5.8        | -5.2      | -4.4       | -3.5       | -5.1 |  | Camphene              | CID_6616    | -5.8 | -4.7 |
| 57 | 42  | 香葉醇 / 牻牛兒苗醇         | 桂花、玫瑰、香茅、天竺葵、玫瑰、大馬士革玫瑰、橙花、爪哇香茅         | 醇          | -5.6        | -5.5       | -4.8       | -4.4      | -5.2       | -4.4      | -5.0        | -4.0      | -5.0       | -3.3       | -4.7 |  | Geraniol              | CID_637566  | -5.6 | -4.7 |
| 58 | 60  | 檸檬醛 β / 檸檬香茅        | 檸檬香茅、山雞椒、香茅、檸檬香茅                       | 醛          | -5.4        | -5.4       | -4.6       | -4.5      | -5.5       | -4.5      | -4.9        | -4.0      | -4.8       | -3.4       | -4.8 |  | Citral                | CID_638011  | -5.5 | -4.7 |
| 59 | 23  | 機香脂醇                | 呂宋檳榔、肉豆蔻                               | 醇          | -5.5        | -5.2       | -5.0       | -4.3      | -6.2       | -4.1      | -5.1        | -3.9      | -4.6       | -3.1       | -4.4 |  | Elemicin              | CID_10248   | -6.2 | -4.7 |
| 60 | 81  | 乙酸薰衣草酯              | 薰衣草                                    | 酯          | -5.6        | -5.3       | -5.0       | -4.8      | -5.4       | -3.8      | -5.1        | -4.0      | -4.6       | -3.0       | -4.8 |  | Lavandulyl acetate    | CID_30247   | -5.6 | -4.7 |
| 61 | 53  | 澄花醇                 | 橙花、大馬士革玫瑰                              | 醇          | -5.4        | -5.7       | -4.8       | -4.1      | -5.4       | -4.0      | -5.1        | -4.1      | -4.7       | -3.1       | -4.8 |  | nerol                 | CID_643820  | -5.7 | -4.7 |
| 62 | 80  | 乙酸芳樟酯 / 乙酸沉香酯       | 薰衣草、快樂鼠尾草、苦橙葉、安古薰衣草、南法薰衣草、佛手柑          | 酯          | -5.5        | -5.7       | -4.8       | -4.4      | -4.9       | -4.2      | -5.3        | -4.1      | -4.6       | -3.0       | -4.7 |  | Linalyl acetate       | CID_8294    | -5.7 | -4.7 |
| 63 | 43  | 沉香醇 / 芳樟醇           | 桂花、樟樹、芳樟、佛手柑、花梨木、芫荽子、橙花、橘、食茱萸          | 醇          | -5.3        | -5.6       | -4.5       | -4.4      | -5.4       | -3.9      | -5.2        | -4.0      | -4.7       | -3.1       | -4.7 |  | Linalool              | CID_6549    | -5.6 | -4.6 |
| 64 | 18  | 紫杉烯                 | 紫杉                                     | 烯          | -5.5        | -5.4       | -4.5       | -4.0      | -5.2       | -3.9      | -5.3        | -4.4      | -4.6       | -3.5       | -4.3 |  | Apiotaxene            | CID_5352710 | -5.5 | -4.6 |
| 65 | 70  | 大茴香醛                | 甜茴香、小茴香、洋茴香、蒔蘿、香草                      | 醛          | -5.6        | -5.3       | -4.2       | -4.4      | -5.7       | -4.2      | -4.9        | -3.6      | -4.6       | -2.9       | -4.4 |  | 4-Methoxybenzaldehyde | CID_31244   | -5.7 | -4.5 |
| 66 | 4   | 香葉烯 / 月桂烯           | 肉桂、馬鞭草、松、杜松、月桂、白芷                      | 烯          | -5.3        | -5.2       | -4.3       | -3.9      | -5.5       | -3.9      | -4.8        | -4.2      | -4.5       | -3.5       | -4.5 |  | Myrcene               | CID_31253   | -5.5 | -4.5 |
| 67 | 1   | 艾蒿三烯                | 艾蒿                                     | 烯          | -5.3        | -5.2       | -4.6       | -4.1      | -5.1       | -4.0      | -4.9        | -4.2      | -4.1       | -3.0       | -4.7 |  | Artemisiatriene       | CID_5320377 | -5.3 | -4.5 |
| 68 | 61  | 香茅醛 / 玫瑰醛           | 香茅、檸檬尤加利、檸檬細籽                          | 醛          | -5.0        | -5.3       | -4.5       | -3.8      | -4.7       | -4.4      | -4.9        | -4.2      | -4.3       | -3.0       | -4.8 |  | Citronellal           | CID_7794    | -5.3 | -4.4 |
| 69 | 44  | 香茅醇                 | 玫瑰、香茅、天竺葵、芫荽子、大馬士革玫瑰                   | 醇          | -5.4        | -5.3       | -4.4       | -4.3      | -4.8       | -3.8      | -4.9        | -4.0      | -4.4       | -3.0       | -4.4 |  | Citronellol           | CID_8842    | -5.4 | -4.4 |
| 70 | 68  | 癸醛                  | 芫荽、檸檬香茅、佛手柑、苦橙葉、橙花、麝尾草、紫羅蘭             | 醛          | -4.6        | -4.6       | -4.0       | -3.2      | -4.4       | -3.4      | -4.4        | -3.6      | -3.8       | -2.7       | -4.2 |  | Decanal               | CID_8175    | -4.6 | -3.9 |
| 71 | 67  | 壬醛                  | 葡萄柚、紅橘、萊姆、紫羅蘭、玫瑰、橙花、錫蘭肉桂               | 醛          | -4.4        | -4.6       | -4.0       | -3.6      | -4.4       | -3.3      | -4.0        | -3.5      | -4.0       | -2.6       | -4.3 |  | Nonanal               | CID_31289   | -4.6 | -3.9 |
| 72 | 66  | 辛醛                  | 玫瑰、橙花、檸檬                               | 醛          | -4.5        | -4.3       | -3.7       | -3.6      | -4.4       | -3.5      | -4.1        | -3.5      | -3.9       | -2.7       | -4.0 |  | Octanal               | CID_454     | -4.5 | -3.8 |
| 73 | 65  | 己醛                  | 薰衣草、香茅木、快樂鼠尾草、甜馬郁蘭                     | 醛          | -4.1        | -4.1       | -3.3       | -3.8      | -4.3       | -3.4      | -3.8        | -3.4      | -4.0       | -2.7       | -3.8 |  | 2-Hexenal             | CID_5281168 | -4.3 | -3.7 |

附錄二、實驗五擴充版精油成分分子模擬對接能量二維溫度表。(第一頁)

| 編碼 | 化學名              | 代表精油                  | 化學分類 | AGE2-HUMAN | SPIKE-SARS2 | AP3A-SARS2 | NCAP-SARS2 | NSB-SA-RS2 | NS7A-SARS2 | NSB-SA-RS2 | ORF9B-SARS2 | RIA-SA-RS2 | VEMP-SARS2 | VME1-SARS2 | 化學結構  | 英文化學名                   | CID          | 最小值   | 平均值  |
|----|------------------|-----------------------|------|------------|-------------|------------|------------|------------|------------|------------|-------------|------------|------------|------------|---|-------------------------|--------------|-------|------|
| 1  | 73 甘草次酸          | 甘草                    | 酸    | -9.1       | -9.6        | -8.6       | -7.6       | -8.9       | -7.0       | -8.9       | -6.8        | -7.2       | -5.9       | -9.0       |    | Enoxolone               | CID_10114    | -9.6  | -8.1 |
| 2  | 100 乙酸乳香酯        | 乳香                    | 酯    | -8.0       | -10.2       | -7.1       | -7.6       | -8.9       | -5.8       | -8.0       | -6.2        | -6.8       | -5.0       | -7.1       |    | Boswellia acid acetate  | CID_11168203 | -10.2 | -7.3 |
| 3  | 77 銀杏內酯          | 銀杏                    | 酯    | -8.4       | -9.0        | -6.8       | -7.2       | -10.2      | -5.5       | -8.8       | -5.9        | -6.6       | -4.2       | -6.7       |    | Ginkgolide B            | CID_6324617  | -10.2 | -7.2 |
| 4  | 56 粉背蕨烯二醇        | 深山粉背蕨                 | 醇    | -7.6       | -8.6        | -7.6       | -6.7       | -8.1       | -5.6       | -7.4       | -5.7        | -6.5       | -4.7       | -6.4       |    | Cheilanthenediol        | CID_90658392 | -8.6  | -6.8 |
| 5  | 16 母菊藍烯          | 德國洋甘菊                 | 烯    | -7.1       | -6.6        | -6.2       | -5.7       | -8.8       | -5.8       | -6.8       | -5.6        | -5.6       | -4.9       | -6.3       |    | Chamazulene             | CID_10719    | -8.8  | -6.3 |
| 6  | 12 咪喃按葉-1,3-二烯   | 沒藥                    | 烯    | -7.1       | -7.5        | -6.5       | -6.0       | -7.0       | -5.3       | -7.3       | -5.9        | -5.9       | -4.3       | -6.3       |    | Furanoeudesma 1,3-Diene | CID_22298470 | -7.5  | -6.3 |
| 7  | 22 維生素A          | 胡蘿蔔                   | 烯    | -7.5       | -7.0        | -6.2       | -5.6       | -7.1       | -5.5       | -7.2       | -5.4        | -5.9       | -4.7       | -6.4       |    | Vitamin A               | CID_445354   | -7.5  | -6.2 |
| 8  | 111 沒藥醇氧化物B      | 德國洋甘菊                 | 氧化物  | -7.3       | -7.1        | -6.5       | -6.1       | -7.1       | -5.5       | -7.3       | -5.4        | -5.7       | -4.0       | -6.4       |    | Bisabolol oxide B       | CID_117301   | -7.3  | -6.2 |
| 9  | 101 沒藥醇氧化物A      | 德國洋甘菊                 | 氧化物  | -7.1       | -7.1        | -6.3       | -5.4       | -6.7       | -4.7       | -7.4       | -5.7        | -6.3       | -4.1       | -6.3       |    | Bisabolone oxide A      | CID_91700388 | -7.4  | -6.1 |
| 10 | 113 廣藿香烯         | 日本扁柏                  | 烯    | -7.3       | -7.3        | -6.5       | -5.6       | -6.3       | -4.7       | -6.6       | -6.4        | -5.1       | -4.6       | -6.4       |    | Patchoulene             | CID_101731   | -7.3  | -6.1 |
| 11 | 103 檜腦           | 日本扁柏                  | 烯    | -7.4       | -6.6        | -5.7       | -5.8       | -7.2       | -5.3       | -6.9       | -5.9        | -5.2       | -4.4       | -5.8       |    | Juniper camphor         | CID_521214   | -7.4  | -6.0 |
| 12 | 88 α-蛇床烯         | 花梨木                   | 烯    | -7.2       | -7.0        | -6.3       | -5.8       | -6.1       | -5.1       | -6.9       | -5.7        | -4.9       | -4.3       | -6.7       |    | alpha-Selinene          | CID_10856614 | -7.2  | -6.0 |
| 13 | 79 苯甲酸苄酯         | 大花茉莉                  | 酯    | -7.1       | -7.0        | -6.0       | -5.3       | -7.1       | -5.1       | -6.2       | -5.2        | -6.0       | -4.1       | -6.5       |    | Benzyl Benzoate         | CID_2345     | -7.1  | -6.0 |
| 14 | 40 大西洋酮          | 大西洋雪松、喜馬拉雅雪松、鬱金香      | 酮    | -6.9       | -7.0        | -6.3       | -5.8       | -7.3       | -4.8       | -6.7       | -5.0        | -5.9       | -3.8       | -5.7       |    | alpha-Atlantone         | CID_12299868 | -7.3  | -5.9 |
| 15 | 102 杜松烯          | 日本扁柏                  | 烯    | -6.6       | -6.4        | -6.6       | -5.8       | -6.4       | -5.1       | -7.1       | -5.7        | -5.3       | -4.1       | -5.8       |    | delta-Cadinene          | CID_441005   | -7.1  | -5.9 |
| 16 | 97 α-按葉醇         | 台灣紅檜                  | 醇    | -6.7       | -6.7        | -6.0       | -5.8       | -6.3       | -5.2       | -7.4       | -5.5        | -5.5       | -3.8       | -5.7       |    | alpha-Eudesmol          | CID_92762    | -7.4  | -5.9 |
| 17 | 14 甜沒藥烯          | 沒藥、薑、德國洋甘菊、黑胡椒        | 烯    | -6.9       | -7.1        | -5.6       | -5.4       | -7.4       | -4.9       | -6.5       | -4.7        | -5.4       | -4.2       | -6.1       |   | Z-gamma-bisabolene      | CID_3033886  | -7.4  | -5.8 |
| 18 | 96 喜馬雪松醇         | 大西洋雪松                 | 醇    | -6.3       | -6.7        | -5.9       | -5.6       | -6.7       | -4.8       | -6.9       | -5.6        | -5.0       | -4.4       | -6.0       |  | cedrol                  | CID_65575    | -6.9  | -5.8 |
| 19 | 112 烯炔雙環醚        | 德國洋甘菊                 | 醚    | -6.7       | -6.7        | -5.9       | -5.2       | -7.1       | -5.0       | -6.4       | -4.7        | -6.0       | -3.8       | -6.2       |  | (E)-En-yn-dicycloether  | CID_5352498  | -7.1  | -5.8 |
| 20 | 41 繸草酮           | 穗甘松、繸草                | 酮    | -6.3       | -7.1        | -5.8       | -5.2       | -6.3       | -4.9       | -6.7       | -5.6        | -4.9       | -4.0       | -6.6       |  | Valerone                | CID_171455   | -7.1  | -5.8 |
| 21 | 50 甜沒藥醇          | 德國洋甘菊                 | 醇    | -6.5       | -6.9        | -5.8       | -5.0       | -6.5       | -4.9       | -6.8       | -5.0        | -5.7       | -4.3       | -6.0       |  | alpha-bisabolol         | CID_442343   | -6.9  | -5.8 |
| 22 | 62 繸草醛           | 甘松、繸草                 | 醛    | -6.5       | -6.5        | -6.0       | -5.4       | -6.8       | -4.7       | -6.7       | -5.6        | -5.1       | -4.1       | -5.9       |  | Valerenal               | CID_6440942  | -6.8  | -5.8 |
| 23 | 105 芳薑黃烯         | 薑黃                    | 烯    | -6.8       | -6.8        | -5.8       | -5.5       | -7.1       | -4.9       | -6.3       | -4.7        | -5.1       | -4.1       | -6.2       |  | ar-Curcumene            | CID_92139    | -7.1  | -5.8 |
| 24 | 93 芳薑黃酮          | 薑黃                    | 酮    | -6.5       | -6.8        | -5.9       | -5.4       | -6.7       | -5.0       | -6.3       | -5.1        | -5.0       | -4.1       | -6.1       |  | ar-tumerone             | CID_558221   | -6.8  | -5.7 |
| 25 | 54 廣藿香醇          | 廣藿香                   | 醇    | -6.4       | -6.4        | -5.6       | -5.2       | -6.6       | -4.7       | -6.6       | -5.7        | -4.8       | -4.2       | -6.4       |  | patchouli alcohol       | CID_10955174 | -6.6  | -5.7 |
| 26 | 51 檀香醇           | 檀香木                   | 醇    | -6.5       | -7.2        | -6.0       | -5.2       | -5.9       | -4.9       | -6.5       | -5.2        | -5.1       | -3.8       | -5.5       |  | alpha-santalol          | CID_11085337 | -7.2  | -5.6 |
| 27 | 49 檜木醇           | 檜木                    | 醇    | -6.4       | -5.9        | -5.4       | -5.7       | -6.8       | -5.3       | -6.0       | -4.9        | -5.8       | -3.7       | -5.6       |  | Hinokitiol              | CID_3611     | -6.8  | -5.6 |
| 28 | 21 莪木烯           | 沒藥                    | 烯    | -6.1       | -6.5        | -5.9       | -5.2       | -6.1       | -5.1       | -6.4       | -5.4        | -5.2       | -3.7       | -5.5       |  | Curzerene               | CID_12305301 | -6.5  | -5.6 |
| 29 | 3 茵陳烯炔           | 茵陳                    | 烯    | -6.4       | -6.1        | -5.1       | -5.1       | -6.7       | -4.7       | -5.8       | -4.8        | -5.3       | -4.2       | -6.2       |  | Capillene               | CID_3083613  | -6.7  | -5.5 |
| 30 | 37 β-突厥酮 / 大馬士革酮 | 玫瑰                    | 酮    | -5.9       | -6.5        | -5.9       | -5.0       | -5.9       | -4.9       | -6.2       | -4.9        | -5.2       | -3.8       | -5.7       |  | damascenone             | CID_5368074  | -6.5  | -5.4 |
| 31 | 110 檜香烯          | 沒藥                    | 烯    | -6.2       | -6.2        | -6.0       | -4.9       | -5.6       | -4.5       | -6.4       | -5.1        | -5.0       | -3.6       | -5.6       |  | elemene                 | CID_6918391  | -6.4  | -5.4 |
| 32 | 52 金合歡醇          | 玫瑰、依蘭                 | 醇    | -6.2       | -6.0        | -5.6       | -4.9       | -6.2       | -4.8       | -6.0       | -4.7        | -5.7       | -3.4       | -5.5       |  | farnesol                | CID_445070   | -6.2  | -5.4 |
| 33 | 75 香薷芥酚          | 野馬鬱蘭                  | 酚    | -6.0       | -5.7        | -4.8       | -5.7       | -6.4       | -4.7       | -6.0       | -5.1        | -5.4       | -3.6       | -5.5       |  | Carvacrol               | CID_10384    | -6.4  | -5.4 |
| 34 | 39 紫羅蘭酮          | 馬鞭草、紫羅蘭、桂花、紅花梔子、穗甘松   | 酮    | -6.2       | -6.2        | -5.6       | -4.8       | -5.9       | -4.7       | -6.2       | -4.6        | -5.1       | -3.9       | -5.5       |  | 3-Oxo-alpha-ionone      | CID_5363885  | -6.2  | -5.3 |
| 35 | 46 松油醇 / 萜品醇     | 樟樹、松木、尤加利、茶樹、食茱萸      | 醇    | -6.0       | -6.3        | -5.2       | -5.1       | -6.2       | -4.7       | -6.0       | -4.7        | -5.1       | -3.5       | -5.5       |  | Alpha-Terpineol         | CID_17100    | -6.3  | -5.3 |
| 36 | 63 金合歡醛          | 香茅、馬鞭草                | 醛    | -6.3       | -6.1        | -5.5       | -4.5       | -6.5       | -4.8       | -5.8       | -4.3        | -4.8       | -4.0       | -5.3       |  | Farnesal                | CID_5280598  | -6.5  | -5.3 |
| 37 | 71 小茴香醛          | 大馬士革、茴香、丁香、百里香、肉桂、尤加利 | 醛    | -5.9       | -5.8        | -5.0       | -5.2       | -6.4       | -5.0       | -5.7       | -4.8        | -4.7       | -3.7       | -5.5       |  | Isopropylbenzaldehyde   | CID_326      | -6.4  | -5.2 |
| 38 | 74 百里香酚          | 百里香百里香                | 酚    | -6.2       | -5.9        | -4.7       | -5.2       | -6.6       | -4.5       | -5.8       | -4.9        | -5.1       | -3.5       | -5.3       |  | Thymol                  | CID_6989     | -6.6  | -5.2 |
| 39 | 13 金合歡烯          | 香茅、橙花、玫瑰、廣藿香、德國洋甘菊    | 烯    | -6.0       | -6.0        | -5.2       | -4.8       | -6.2       | -4.6       | -5.6       | -4.7        | -5.2       | -4.0       | -5.2       |  | alpha-Farnesene         | CID_5281516  | -6.2  | -5.2 |
| 40 | 7 萜品油烯           | 尤加利、茶樹、松脂             | 烯    | -6.2       | -5.5        | -5.1       | -4.8       | -6.1       | -4.6       | -5.8       | -4.9        | -5.3       | -3.7       | -5.5       |  | Terpinolene             | CID_11463    | -6.2  | -5.2 |
| 41 | 106 乙酸肉桂酯        | 台灣土肉桂                 | 酯    | -6.1       | -5.7        | -5.2       | -4.8       | -6.7       | -4.5       | -5.5       | -4.3        | -5.4       | -3.9       | -5.0       |  | Cinnamyl acetate        | CID_5282110  | -6.7  | -5.2 |
| 42 | 25 黃樟素           | 樟樹(本樟、牛樟)精油           | 醚    | -6.0       | -5.8        | -5.1       | -5.1       | -6.1       | -4.5       | -5.8       | -4.6        | -5.0       | -3.4       | -5.6       |  | Saffrole                | CID_5144     | -6.1  | -5.2 |
| 43 | 89 對傘花煙          | 月桃、莢蒾子、茶樹             | 烯    | -5.8       | -5.7        | -4.8       | -4.8       | -6.2       | -4.6       | -5.7       | -5.1        | -4.9       | -3.7       | -5.5       |  | p-CYMENE                | CID_7463     | -6.2  | -5.2 |
| 44 | 8 萜品烯 / γ-萜品烯    | 松樹、杜松、茶樹、檜、檸檬         | 烯    | -5.8       | -5.7        | -4.8       | -4.9       | -6.4       | -4.7       | -5.8       | -4.8        | -4.8       | -3.5       | -5.5       |  | gamma-Terpinene         | CID_7461     | -6.4  | -5.2 |
| 45 | 26 肉豆蔻醛          | 歐芹、肉豆蔻                | 醛    | -6.0       | -5.6        | -5.6       | -4.9       | -6.1       | -4.7       | -5.6       | -4.3        | -5.2       | -3.4       | -5.1       |  | Myristicin              | CID_4276     | -6.1  | -5.1 |
| 46 | 36 胡薄荷酮          | 胡薄荷                   | 酮    | -5.7       | -6.4        | -5.4       | -4.8       | -5.2       | -4.2       | -5.7       | -4.9        | -5.5       | -3.5       | -5.2       |  | Pulegone                | CID_442495   | -6.4  | -5.1 |
| 47 | 87 α-萜品烯         | 茶樹                    | 烯    | -5.8       | -5.7        | -4.9       | -4.7       | -6.1       | -4.8       | -5.7       | -4.6        | -4.8       | -3.5       | -5.4       |  | alpha-Terpinene         | CID_7462     | -6.1  | -5.1 |
| 48 | 98 乙酸龍腦酯         | 馬鞭草酮迷迭香、台灣土肉桂         | 酯    | -5.2       | -6.3        | -5.3       | -4.6       | -5.4       | -4.2       | -6.3       | -4.9        | -4.8       | -3.6       | -5.3       |  | Bornyl acetate          | CID_93009    | -6.3  | -5.1 |
| 49 | 35 左旋香芹酮 / 藏茴香酮  | 綠薄荷                   | 酮    | -5.4       | -6.1        | -5.6       | -4.7       | -5.3       | -4.3       | -5.8       | -4.6        | -5.0       | -3.6       | -5.4       |  | R-Cardvone              | CID_439570   | -6.1  | -5.1 |
| 50 | 64 甜橙醛           | 甜橙、紅橘                 | 醛    | -5.9       | -5.7        | -5.1       | -4.3       | -5.8       | -4.8       | -5.9       | -4.4        | -4.9       | -3.7       | -5.2       |  | beta-Sinensal           | CID_5281535  | -5.9  | -5.1 |
| 51 | 34 右旋香芹酮 / 藏茴香酮  | 藏茴香、蒔蘿籽               | 酮    | -5.4       | -6.1        | -5.6       | -4.7       | -5.2       | -4.2       | -5.8       | -4.6        | -5.3       | -3.6       | -5.2       |  | S-Cardvone              | CID_16724    | -6.1  | -5.1 |
| 52 | 47 松油烯4醇 / 萜品烯4醇 | 馬鞭草、肉豆蔻、月桃、茶樹、薰衣草     | 醇    | -6.1       | -6.2        | -5.4       | -4.8       | -5.2       | -4.1       | -5.5       | -4.5        | -5.2       | -3.4       | -5.0       |  | 4-Cardvomenthenol       | CID_11230    | -6.2  | -5.0 |

附錄二、實驗五擴充版精油成分分子模擬對接能量二維溫度表。(第二頁)

| 編碼 | 化學名                        | 代表精油                                    | 化學分類 | ACE2_H UMAN | SPIKE SARS2 | AP3A_S ARS2 | NGAP SARS2 | NS6_SA RS2 | NS7A_S ARS2 | NS8_SA RS2 | ORF9B SARS2 | RIA_SA RS2 | VEMP SARS2 | VME1_S ARS2 | 化學結構  | 英文化學名                 | CID          | 最小值  | 平均值  |
|----|----------------------------|---|------|-------------|-------------|-------------|------------|------------|-------------|------------|-------------|------------|------------|-------------|---|-----------------------|--------------|------|------|
| 53 | 33 馬鞭草酮                    | 馬鞭草酮迷迭香、樟腦迷迭香                           | 酮    | -5.1        | -5.7        | -5.2        | -4.6       | -5.3       | -4.1        | -5.9       | -5.1        | -5.2       | -3.3       | -5.2        |    | Verbenone             | CID_92874    | -5.9 | -5.0 |
| 54 | 69 肉桂醛                     | 台灣土肉桂、錫蘭肉桂                              | 醛    | -6.0        | -5.6        | -4.6        | -5.0       | -6.1       | -4.5        | -5.4       | -4.2        | -4.6       | -3.7       | -4.9        |    | Cinnamaldehyde        | CID_637511   | -6.1 | -5.0 |
| 55 | 107 檜烯                     | 白芷                                      | 烯    | -5.2        | -5.8        | -4.8        | -4.4       | -5.7       | -4.1        | -5.6       | -5.2        | -5.0       | -3.5       | -4.9        |    | Sabinene              | CID_10887971 | -5.8 | -4.9 |
| 56 | 29 α-側柏酮 / 崖柏酮             | 側柏、鼠尾草、艾草                               | 酮    | -5.3        | -6.5        | -5.0        | -4.3       | -5.1       | -4.3        | -5.7       | -4.9        | -4.7       | -3.3       | -5.0        |    | alpha-Thujone         | CID_261491   | -6.5 | -4.9 |
| 57 | 76 丁香酚                     | 台灣土肉桂、丁香花苞、肉桂葉                          | 酚    | -5.7        | -5.8        | -4.7        | -4.3       | -5.9       | -4.7        | -5.3       | -4.2        | -4.8       | -3.3       | -5.2        |    | Eugenol               | CID_3314     | -5.9 | -4.9 |
| 58 | 78 乙酸苄酯                    | 大花茉莉                                    | 酯    | -5.8        | -5.5        | -4.9        | -5.0       | -5.7       | -4.2        | -5.1       | -4.2        | -5.1       | -3.4       | -4.9        |    | Benzyl acetate        | CID_8785     | -5.8 | -4.9 |
| 59 | 32 薄荷酮                     | 綠薄荷、胡椒薄荷                                | 酮    | -5.6        | -5.7        | -4.8        | -4.4       | -5.0       | -4.0        | -5.7       | -4.7        | -5.2       | -3.2       | -5.4        |    | Menthone              | CID_26447    | -5.7 | -4.9 |
| 60 | 6 右旋檸檬烯                    | 柑橘類、松葉、薄荷                               | 烯    | -5.4        | -5.7        | -5.1        | -4.8       | -5.0       | -4.1        | -5.4       | -4.7        | -5.0       | -3.5       | -4.9        |    | D-Limonene            | CID_440917   | -5.7 | -4.9 |
| 61 | 27 芹菜醛                     | 歐芹精油                                    | 醛    | -6.0        | -5.4        | -5.3        | -4.8       | -5.7       | -4.4        | -5.4       | -3.9        | -4.8       | -3.1       | -4.8        |    | Apiole                | CID_10659    | -6.0 | -4.9 |
| 62 | 28 玫瑰醛                     | 玫瑰                                      | 醛    | -5.7        | -5.9        | -5.1        | -4.4       | -5.3       | -4.0        | -5.5       | -4.7        | -4.6       | -3.3       | -5.0        |    | Rose oxide            | CID_7093102  | -5.9 | -4.9 |
| 63 | 20 α-側柏烯                   | 乳香                                      | 烯    | -5.7        | -5.7        | -4.9        | -4.8       | -4.9       | -4.2        | -5.5       | -5.1        | -4.4       | -3.3       | -5.0        |    | alpha-Thujene         | CID_17868    | -5.7 | -4.9 |
| 64 | 24 細辛醛                     | 菖蒲精油                                    | 醛    | -6.1        | -5.2        | -5.1        | -4.6       | -6.0       | -4.4        | -5.3       | -3.9        | -4.7       | -3.3       | -4.7        |    | Asarone               | CID_636822   | -6.1 | -4.8 |
| 65 | 95 桃金娘醇                    | 台灣紅檜                                    | 醇    | -5.1        | -5.7        | -5.0        | -4.4       | -5.1       | -4.5        | -5.6       | -4.7        | -4.8       | -3.3       | -5.0        |    | Myrtenol              | CID_10582    | -5.7 | -4.8 |
| 66 | 19 α-松油醇 / 派烯 / 松油烯 / α-蒎烯 | 台灣紅檜迷迭香、藍桉、澳洲尤加利、金露、澳洲尤加利、金露、安息香、祕魯香脂   | 烯    | -4.8        | -6.0        | -5.1        | -4.3       | -4.9       | -4.0        | -5.6       | -4.9        | -4.8       | -3.5       | -5.2        |    | alpha-Pinene          | CID_6654     | -6.0 | -4.8 |
| 67 | 45 薄荷醇                     | 薄荷                                      | 醇    | -6.1        | -5.7        | -5.1        | -4.3       | -5.2       | -3.8        | -5.3       | -5.0        | -4.4       | -3.1       | -5.1        |    | l-Menthhol            | CID_16666    | -6.1 | -4.8 |
| 68 | 86 β-松油醇                   | 檸檬、橘、黑胡椒                                | 烯    | -5.0        | -5.5        | -5.0        | -4.4       | -4.9       | -3.8        | -5.8       | -5.3        | -4.6       | -3.4       | -5.3        |    | beta-Pinene           | CID_14896    | -5.8 | -4.8 |
| 69 | 30 β-側柏酮 / 崖柏酮             | 南木蒿                                     | 酮    | -5.9        | -5.7        | -5.0        | -4.4       | -4.8       | -3.7        | -5.7       | -4.8        | -4.7       | -3.2       | -4.9        |   | beta-Thujone          | CID_91456    | -5.9 | -4.8 |
| 70 | 57 1,8-桉油醇 / 桉葉油素          | 白千層、茶樹、薑黃、澳洲尤加利、金露、澳洲尤加利、金露、香茅、安息香、祕魯香脂 | 醇    | -5.1        | -5.5        | -5.0        | -4.4       | -4.9       | -3.8        | -5.9       | -4.8        | -5.0       | -3.4       | -4.9        |  | Eucalyptol            | CID_2758     | -5.9 | -4.8 |
| 71 | 72 香草醛                     | 香草                                      | 醛    | -5.8        | -5.6        | -4.7        | -4.7       | -5.7       | -4.4        | -5.0       | -3.8        | -5.3       | -3.0       | -4.6        |  | Vanillin              | CID_1183     | -5.8 | -4.8 |
| 72 | 59 順式檸檬醛 / 檸檬醛 α / 牻牛兒醛    | 檸檬香茅、檸檬、山雞椒                             | 醛    | -5.3        | -5.4        | -4.6        | -4.6       | -5.7       | -4.4        | -5.0       | -4.5        | -4.9       | -3.1       | -5.0        |  | Neral                 | CID_643779   | -5.7 | -4.8 |
| 73 | 109 亞油酸乙酯                  | 白芷                                      | 酯    | -5.3        | -5.5        | -4.7        | -4.2       | -5.3       | -3.9        | -5.6       | -4.1        | -4.8       | -4.2       | -4.9        |  | Ethyl linoleate       | CID_5282184  | -5.6 | -4.8 |
| 74 | 31 樟腦 / 龍腦酮                | 樟樹、芳樟、薰衣草、樟腦迷迭香                         | 酮    | -4.9        | -5.4        | -5.2        | -4.6       | -5.0       | -4.0        | -5.8       | -4.8        | -4.4       | -3.4       | -4.9        |  | Camphor               | CID_159055   | -5.8 | -4.8 |
| 75 | 5 羅勒烯                      | 羅勒、紫蘇                                   | 烯    | -5.6        | -5.4        | -4.6        | -4.4       | -5.7       | -4.0        | -5.0       | -4.4        | -4.5       | -3.6       | -5.1        |  | beta-Ocimene          | CID_5281553  | -5.7 | -4.8 |
| 76 | 82 咖啡因                     | 咖啡                                      | 氧化物  | -5.3        | -5.9        | -4.9        | -4.9       | -6.0       | -4.2        | -5.0       | -3.9        | -5.1       | -2.7       | -4.3        |  | Caffeine              | CID_2519     | -6.0 | -4.7 |
| 77 | 2 樟烯                       | 樟、柏、香茅                                  | 烯    | -4.8        | -5.5        | -4.9        | -4.2       | -4.9       | -3.7        | -5.8       | -5.2        | -4.4       | -3.5       | -5.1        |  | Camphene              | CID_6616     | -5.8 | -4.7 |
| 78 | 42 香葉醇 / 牻牛兒醇              | 桂花、玫瑰、香茅、天竺葵、玫瑰草、大馬士革玫瑰、橙花、瓜哇香茅         | 醇    | -5.6        | -5.5        | -4.8        | -4.4       | -5.2       | -4.4        | -5.0       | -4.0        | -5.0       | -3.3       | -4.7        |  | Geraniol              | CID_637566   | -5.6 | -4.7 |
| 79 | 60 反式檸檬醛 / 檸檬醛 β / 橙花醛     | 檸檬香茅、山雞椒、香茅草、檸檬香桃木                      | 醛    | -5.4        | -5.4        | -4.6        | -4.5       | -5.5       | -4.5        | -4.9       | -4.0        | -4.8       | -3.4       | -4.8        |  | Citral                | CID_638011   | -5.5 | -4.7 |
| 80 | 92 諾品酮                     | 台灣紅檜                                    | 酮    | -5.0        | -5.3        | -4.8        | -4.4       | -4.7       | -4.0        | -5.7       | -4.8        | -4.8       | -3.2       | -4.9        |  | Nopinone              | CID_32735    | -5.7 | -4.7 |
| 81 | 23 檀香脂醛                    | 呂宋椒、肉豆蔻                                 | 醛    | -5.5        | -5.2        | -5.0        | -4.3       | -6.2       | -4.1        | -5.1       | -3.9        | -4.6       | -3.1       | -4.4        |  | Elemicin              | CID_10248    | -6.2 | -4.7 |
| 82 | 81 乙酸薰衣草酯                  | 薰衣草                                     | 酯    | -5.6        | -5.3        | -5.0        | -4.8       | -5.4       | -3.8        | -5.1       | -4.0        | -4.6       | -3.0       | -4.8        |  | Lavandulyl acetate    | CID_30247    | -5.6 | -4.7 |
| 83 | 53 橙花醇                     | 橙花、大馬士革玫瑰                               | 醇    | -5.4        | -5.7        | -4.8        | -4.1       | -5.4       | -4.0        | -5.1       | -4.1        | -4.7       | -3.1       | -4.8        |  | nerol                 | CID_643820   | -5.7 | -4.7 |
| 84 | 80 乙酸芳樟醇 乙酸沉香醇             | 薰衣草、快樂鼠尾草、菩提葉、安白薰衣草、南法薰衣草、佛手柑           | 酯    | -5.5        | -5.7        | -4.8        | -4.4       | -4.9       | -4.2        | -5.3       | -4.1        | -4.6       | -3.0       | -4.7        |  | Linalyl acetate       | CID_8294     | -5.7 | -4.7 |
| 85 | 43 沉香醇 / 芳樟醇               | 桂花、檸檬、芳樟、佛手柑、花梨木、芫荽子、橙花、橘、鹿柴葉           | 醇    | -5.3        | -5.6        | -4.5        | -4.4       | -5.4       | -3.9        | -5.2       | -4.0        | -4.7       | -3.1       | -4.7        |  | Linalool              | CID_6549     | -5.6 | -4.6 |
| 86 | 18 紫杉烯                     | 紫杉                                      | 烯    | -5.5        | -5.4        | -4.5        | -4.0       | -5.2       | -3.9        | -5.3       | -4.4        | -4.6       | -3.5       | -4.3        |  | Apitaxene             | CID_5352710  | -5.5 | -4.6 |
| 87 | 70 大茴香醛                    | 甜茴香、小茴香、洋茴香、蒔蘿、香草                       | 醛    | -5.6        | -5.3        | -4.2        | -4.4       | -5.7       | -4.2        | -4.9       | -3.6        | -4.6       | -2.9       | -4.4        |  | 4-Methoxybenzaldehyde | CID_31244    | -5.7 | -4.5 |
| 88 | 4 香葉烯 / 月桂烯                | 肉桂、馬鞭草、松、杜松、月桂、白芷                       | 烯    | -5.3        | -5.2        | -4.3        | -3.9       | -5.5       | -3.9        | -4.8       | -4.2        | -4.5       | -3.5       | -4.5        |  | Myrcene               | CID_31253    | -5.5 | -4.5 |
| 89 | 1 艾蒿三烯                     | 艾蒿                                      | 烯    | -5.3        | -5.2        | -4.6        | -4.1       | -5.1       | -4.0        | -4.9       | -4.2        | -4.1       | -3.0       | -4.7        |  | Artemisiatriene       | CID_5320377  | -5.3 | -4.5 |
| 90 | 61 香茅醛 / 玫瑰醛               | 香茅、檸檬尤加利、檸檬細籽                           | 醛    | -5.0        | -5.3        | -4.5        | -3.8       | -4.7       | -4.4        | -4.9       | -4.2        | -4.3       | -3.0       | -4.8        |  | Citronellal           | CID_7794     | -5.3 | -4.4 |
| 91 | 44 香茅醇                     | 玫瑰、香茅、天竺葵、芫荽子、大馬士革玫瑰                    | 醇    | -5.4        | -5.3        | -4.4        | -4.3       | -4.8       | -3.8        | -4.9       | -4.0        | -4.4       | -3.0       | -4.4        |  | Citronellol           | CID_8842     | -5.4 | -4.4 |
| 92 | 108 月桂酸乙酯                  | 白芷                                      | 酯    | -5.0        | -5.0        | -4.6        | -4.4       | -5.0       | -3.4        | -5.0       | -3.7        | -4.4       | -3.2       | -4.6        |  | Ethyl laurate         | CID_7800     | -5.0 | -4.4 |
| 93 | 99 乙酸辛酯                    | 乳香                                      | 酯    | -4.7        | -4.9        | -4.3        | -4.1       | -4.9       | -3.4        | -4.7       | -3.4        | -4.5       | -2.6       | -4.0        |  | Octyl acetate         | CID_8164     | -4.9 | -4.1 |
| 94 | 68 癸醛                      | 芫荽、檸檬香茅、佛手柑、菩提葉、橙花、鹿柴葉、紫羅蘭              | 醛    | -4.6        | -4.6        | -4.0        | -3.2       | -4.4       | -3.4        | -4.4       | -3.6        | -3.8       | -2.7       | -4.2        |  | Decanal               | CID_8175     | -4.6 | -3.9 |
| 95 | 67 壬醛                      | 葡萄柚、紅橘、萊姆、紫羅蘭、玫瑰、橙花、錫蘭肉桂                | 醛    | -4.4        | -4.6        | -4.0        | -3.6       | -4.4       | -3.3        | -4.0       | -3.5        | -4.0       | -2.6       | -4.3        |  | Nonanal               | CID_31289    | -4.6 | -3.9 |
| 96 | 66 辛醛                      | 玫瑰、橙花、檸檬                                | 醛    | -4.5        | -4.3        | -3.7        | -3.6       | -4.4       | -3.5        | -4.1       | -3.5        | -3.9       | -2.7       | -4.0        |  | Octanal               | CID_454      | -4.5 | -3.8 |
| 97 | 65 己醛                      | 薰衣草、香桃木、快樂鼠尾草、甜馬郁蘭                      | 醛    | -4.1        | -4.1        | -3.3        | -3.8       | -4.3       | -3.4        | -3.8       | -3.4        | -4.0       | -2.7       | -3.8        |  | 2-Hexenal             | CID_5281168  | -4.3 | -3.7 |

## 【評語】 032809

本作品利用數值計算分析精油對接的強度與其可能用於病毒防護的效能，具有應用價值。

利用分子模擬對接技術預測據新冠病毒防護力的精油是一個有趣的研究方向。

對於本研究，我們有以下之建議：

- (1) 如何確認其效益、有效性，仍需做進一步的實際實驗分析。
- (2) 預測僅僅是理論上的推測，理論的推測有其限制性，例如某些參數條件之下。
- (3) 若能加上實際之驗證，可讓此研究正完整。

# 作品海報



# 精油所至，病毒離開



利用分子模擬對接技術預測具新冠病毒防護力的精油

## 摘要

本研究使用電腦模擬藥物的對接技術，快速有效的預測新冠肺炎病毒潛力防護精油。第一階段研究依據化學分子分類蒐集82種精油成份，建立分子結構資料庫與新冠肺炎病毒蛋白和人類受體蛋白ACE2共11種蛋白質結構資料庫，使用AutoDock Vina分子模擬對接技術，計算對接能量數值及溫度圖，預測潛力防護精油成分，並探討預測成效。根據對接結果數值，並與目前已發表研究成果交叉比對，預測效果達80%。因此第二階段以30種台灣常見精油之主要成分擴充精油分子資料庫，進行分子模擬對接計算，預測具新冠病毒防護力的潛力常見精油。本次科展研究結果所得的潛力防護精油，不僅具深入研究價值，也為後疫情時代提供具高度參考性的生活防疫方式，用以保護我們身邊所愛的家人。

## 研究目的

**研究目的1** 探討電腦分子模擬對接技術預測成效，篩選具新冠病毒防護力的潛力精油成分。

實驗一：建立精油成分資料庫

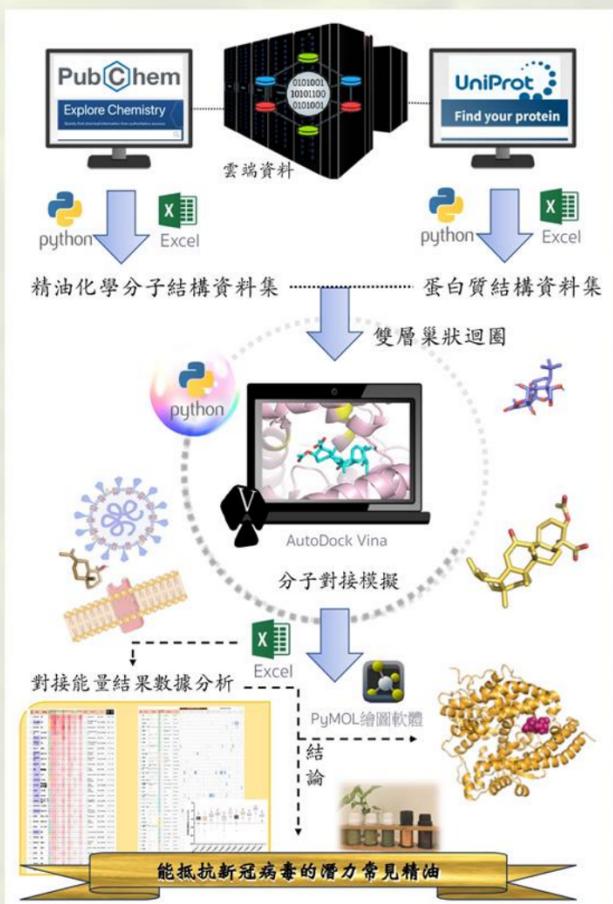
實驗二：建立蛋白質結構資料庫

實驗三：使用電腦分子對接技術，預測最佳潛力精油化學分子，並探討預測成效。

**研究目的2** 運用前一個研究目的所得的有效的分子對接預測方法，找出台灣常見精油中，具新冠病毒防護力的潛力精油。

實驗四：建立常見精油之擴充版精油成分資料庫

實驗五：使用電腦分子模擬對接技術，對應常見精油擴充版精油成分資料庫，預測具新冠病毒防護力的潛力常見精油。



圖一、研究架構圖

### 實驗一步驟 建立精油成分資料庫

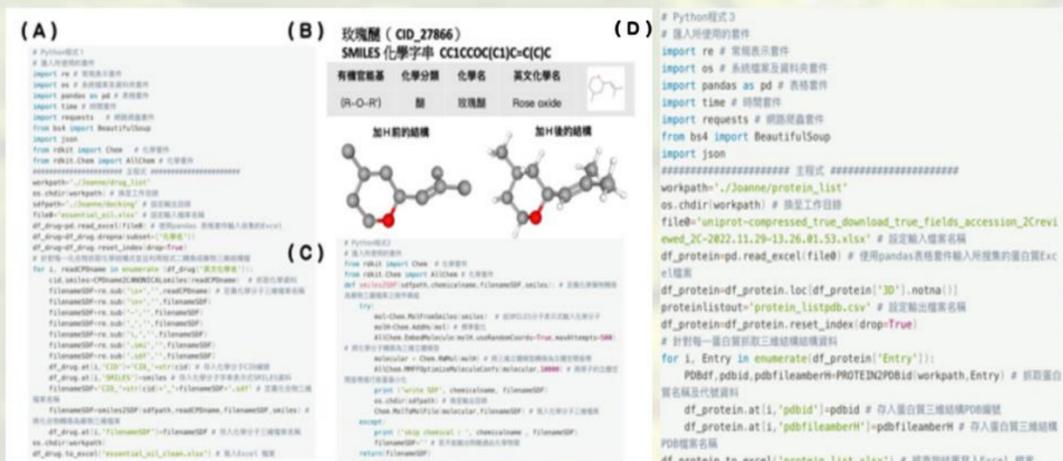
(1) 依據化學官能基分類蒐集82種精油成分，以Excel整理製作輸入化學分子名稱及其所代表之精油名稱。

(2) 以Python程式1、Pandas表格存取模組及Excel整理化學分子名稱，轉換為精油成分化學分子字串表示式SMILES。

(3) 以Python程式2、Pandas表格存取模組及Excel將精油內含物分子字串表示式SMILES轉換為三度空間化學結構資料庫，完成精油成分化學分子結構之分子對接前預備工作。

**實驗一結果** 精油成分資料庫以官能基分類，依據實驗資料分類歸納進行編序，結果得到編號1-22為烯類，編號23-28為醚類，編號29-41為酮類，編號42-58為醇類，編號59-72為醛類，編號73為酸類，編號74-76為酚類，編號77-81為酯類，編號82為氧化物。使用RDKit模組將精油化學分子的SMILES字串轉換為三度空間化學結構檔案SDF檔案資料庫，完成較大數量的精油成分資料庫。(圖三)

**實驗二結果** 具有三度空間結構的新冠病毒蛋白質，有棘蛋白SPIKE\_SARS2、鞘蛋白VEMP\_SARS2、核蛋白NCAP\_SARS2、膜蛋白VME1\_SARS2、複製酶聚合蛋白R1A\_SARS2、其他功能蛋白AP3A\_SARS2、NS6\_SARS2、NS8\_SARS2、NS7A\_SARS2和ORF9B\_SARS2與人體受體蛋白ACE2\_HUMAN，共11種，並使用AMBER的標準蛋白質力場修正蛋白質氨基酸分子內原子鍵結及氫原子組態，並使用Excel整理完成蛋白質結構PDB檔案資料庫。(圖四)



圖二、(A) Python程式1。(B) 化學分子字串表示式SMILES。(C) Python程式2。(D) Python程式3。

| 編號 | 化學分類 | 化學名       | 代表精油              | 化學結構 | CID        | 編號 | 化學分類 | 化學名  | 代表精油  | 化學結構 | CID        | 編號 | 化學分類 | 化學名       | 代表精油       | 化學結構 | CID        |
|----|------|-----------|-------------------|------|------------|----|------|------|-------|------|------------|----|------|-----------|------------|------|------------|
| 1  | 烯    | 艾羅三烯      | 艾羅                |      | 00,5320377 | 21 | 烯    | 羅木烯  | 羅木    |      | 00,5727266 | 61 | 酸    | 香茅酸 / 玫瑰酸 | 香茅、檸檬大馬、檸檬 |      | 00,7794    |
| 2  | 烯    | 檸檬        | 檸檬、橙、佛手           |      | 00,50221   | 22 | 烯    | 檸檬素A | 檸檬    |      | 00,465294  | 62 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,5440942 |
| 3  | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬                |      | 00,308203  | 23 | 醚    | 檸檬素B | 檸檬    |      | 00,30248   | 63 | 醇    | 金盞醇       | 香茅、佛手      |      | 00,5285908 |
| 4  | 烯    | 檸檬烯 / 檸檬烯 | 檸檬、佛手、佛手柑、佛手柑、佛手柑 |      | 00,31253   | 24 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,336822  | 64 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,5285935 |
| 5  | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,5285653 | 25 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,5144    | 65 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,5285908 |
| 6  | 烯    | 檸檬烯 / 檸檬烯 | 檸檬、佛手、佛手柑、佛手柑、佛手柑 |      | 00,440917  | 26 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,4270    | 66 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,454     |
| 7  | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,11463   | 27 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,30959   | 67 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,31289   |
| 8  | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,7461    | 28 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,27866   | 68 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,8175    |
| 9  | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,6654    | 29 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,26491   | 69 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,83701   |
| 10 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,440917  | 30 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,34456   | 70 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,31244   |
| 11 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,31253   | 31 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,53955   | 71 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,326     |
| 12 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,222847  | 32 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,24447   | 72 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,183     |
| 13 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,5285653 | 33 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,32874   | 73 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,3014    |
| 14 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,3032866 | 34 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,36724   | 74 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,8889    |
| 15 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,5285653 | 35 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,439570  | 75 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,30364   |
| 16 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,10719   | 36 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,442495  | 76 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,3014    |
| 17 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,5285653 | 37 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,5366704 | 77 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,8395    |
| 18 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,53955   | 38 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,5366704 | 78 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,2345    |
| 19 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,6654    | 39 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,5363685 | 79 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,8294    |
| 20 | 烯    | 檸檬烯       | 檸檬、佛手             |      | 00,17668   | 40 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,2229998 | 80 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,8294    |
|    |      |           |                   |      |            | 41 | 醇    | 檸檬醇  | 檸檬、佛手 |      | 00,396646  | 81 | 醇    | 檸檬醇       | 檸檬、佛手      |      | 00,30247   |
|    |      |           |                   |      |            |    |      |      |       |      |            | 82 | 氧化物  | 檸檬醇       | 檸檬         |      | 00,2819    |

圖三、實驗一精油成分資料庫

### 實驗二步驟 建立蛋白質分子資料庫

(1) 由國際蛋白質資料庫(UniProt)篩選出具有已知三度空間結構之目標蛋白質。

(2) 由國際蛋白質結構資料庫(RCSB PDB)下載10個新冠病毒蛋白質及1個人類受體蛋白ACE2三度空間結構資料。

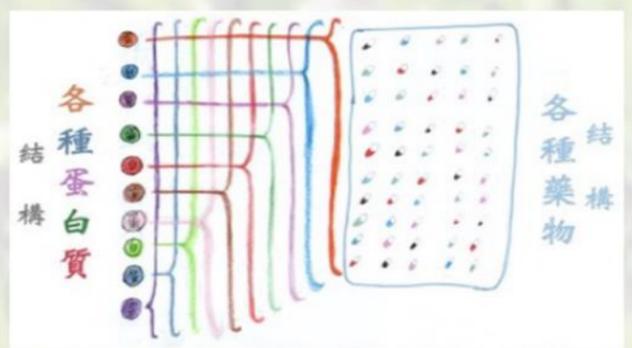
(3) 以Python程式3、並Pandas表格存取模組及Excel整理蛋白質結構資料，清除其他非蛋白質結構資訊，並使用AMBER蛋白質力場修正蛋白質氨基酸分子中的原子鍵結及組態，完成蛋白質結構之分子模擬對接前預備工作。

| 蛋白質代號 | 蛋白質名稱       | 生物體                          | 三維結構PDB編號 |
|-------|-------------|------------------------------|-----------|
| 1     | R1A_SARS2   | 嚴重急性呼吸道症候群冠狀病毒2型(SARS-CoV-2) | 7D47      |
| 2     | SPIKE_SARS2 | 刺突糖蛋白                        | 7SBP      |
| 3     | NCAP_SARS2  | 核蛋白                          | 6Y13      |
| 4     | VEMP_SARS2  | 包膜小囊蛋白(鞘蛋白)                  | 7K3G      |
| 5     | VME1_SARS2  | 膜蛋白                          | 7VGR      |
| 6     | AP3A_SARS2  | 附屬非重疊轉譯區ORF3a 蛋白             | 6XDC      |
| 7     | NS6_SARS2   | 附屬非重疊轉譯區ORF6 蛋白              | 7VPH      |
| 8     | NS8_SARS2   | 附屬非重疊轉譯區ORF8 蛋白              | 7JTL      |
| 9     | NS7A_SARS2  | 附屬非重疊轉譯區ORF7a 蛋白             | 7C13      |
| 10    | ORF9B_SARS2 | 附屬重疊轉譯區ORF9b 蛋白              | 6Z4U      |
| 1     | ACE2_HUMAN  | ACE2受體蛋白                     | 7DQA      |

圖四、實驗二蛋白質分子資料庫

**實驗三步驟** 使用電腦分子模擬對接技術預測精油化學成分對病毒及人類受體蛋白質結合力，並探討其病毒防護預測成效。

- (1) 以Python程式與分子模擬對接技術，進行雙層巢狀迴圈之排列組合。第一層樣本為實驗一82個精油成分化學分子結構SDF檔案，第二層樣本為實驗二11個蛋白質結構PDB檔案（圖五）。
- (2) 使用AutoDock Vina進行分子對接模擬，計算對接能量數值。
- (3) 輸出精油成分化學分子與病毒蛋白質分子的對接能量數值，用Excel繪製成對接能量溫度圖預測出有新冠病毒防護力的潛力精油化學成分。
- (4) 搜尋已發表的學術相關研究，探討驗證所使用電腦分子模擬對接技術，其預測潛力精油化學成分的預測效能。



圖五、雙層巢狀迴圈示意圖

**實驗三結果** 73個精油化學分子中獲得38個分子對接能量數值屬強結合性（結合親和力小於或等於 -7 kcal/mol）的對接組合，共11種精油化學成分（水藍色標註）。對接能量溫度圖中顏色最深的數值是編號77銀杏內酯對接病毒NS6\_SARS2蛋白，能量數值為 -10.2 kcal/mol，為最穩定結合。編號73甘草精油中的甘草次酸，對接病毒棘蛋白SPIKE\_SARS2的組合，能量數值為 -9.6 kcal/mol，為第二低的數值。編號16母菊藍烯對接病毒NS6\_SARS2的能量數值 -8.8 kcal/mol為第三低能量的強結合。對接能量平均值前五名的精油化學成分，若排除鞘蛋白VEMP\_SARS2的對接結合親和力大於 -5 kcal/mol以外，前五名的精油分子與其他十種目標蛋白，皆為強結合性或一般結合性對接效果（圖六）。

將蛋白質分子與精油化學分子對接能量製成蛋白質分群對接能量箱型圖，顯示箱型底標10% 數值，對接能量最低的三種蛋白質為：人體受體蛋白質ACE2、病毒棘蛋白SPIKE\_SARS2和病毒核蛋白NS6\_SARS2，對接能量落在 -7 kcal/mol以下，且為強對接組合占比最高的三種蛋白質，因此可作為深入研究的潛力目標蛋白質（圖七）。

對接能量平均值排序前五名的精油成分已有四種成分與新冠病毒或其他病毒相關的學術研究，相當於80%交叉驗證預測效能。顯示這次的研究所建立的篩選模式具深入研究價值，因此推測本次研究為有效預測潛力新冠病毒防護精油的方法。

| 編號 | 化學名 | 代表精油  | 化學分類 | ACE2_HUMAN | SPIKE_SARS2 | APFA_SARS2 | NCAP_SARS2 | NS6_SA | NS6_NSA | NS6_NSA2 | ORF9B_SARS2 | ORF9B_SARS2_2 | ORF9B_SARS2_3 | ORF9B_SARS2_4 | ORF9B_SARS2_5         | ORF9B_SARS2_6 | ORF9B_SARS2_7 | ORF9B_SARS2_8 | ORF9B_SARS2_9 | ORF9B_SARS2_10 | ORF9B_SARS2_11 | 英文化學名 | CID | 平均最小值 |  |
|----|-----|-------|------|------------|-------------|------------|------------|--------|---------|----------|-------------|---------------|---------------|---------------|-----------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|----------------|----------------|-------|-----|-------|--|
| 1  | 73  | 甘草次酸  | 萜類   | -9.1       | -9.6        | -8.6       | -7.6       | -8.9   | -7.0    | -8.9     | -6.8        | -7.2          | -5.9          | -8.0          | Enkephalin            | CID_10114     | -6.6          | -6.1          |               |                |                |       |     |       |  |
| 2  | 77  | 銀杏內酯  | 萜類   | -8.4       | -9.0        | -6.0       | -7.2       | -10.2  | -5.5    | -8.8     | -5.9        | -6.6          | -4.2          | -6.7          | Ginkgolide B          | CID_6324817   | -10.2         | -7.2          |               |                |                |       |     |       |  |
| 3  | 56  | 松葉蕨二萜 | 萜類   | -7.8       | -8.6        | -7.6       | -6.7       | -8.1   | -5.6    | -7.4     | -5.7        | -6.5          | -4.7          | -6.4          | Chalanthoidiol        | CID_90658392  | -8.6          | -4.8          |               |                |                |       |     |       |  |
| 4  | 16  | 母菊藍烯  | 萜類   | -7.1       | -6.6        | -6.2       | -5.7       | -8.8   | -5.8    | -6.6     | -5.6        | -5.6          | -4.9          | -6.3          | Chamazulene           | CID_10719     | -8.8          | -4.3          |               |                |                |       |     |       |  |
| 5  | 12  | 檸檬醛   | 萜類   | -7.1       | -7.5        | -6.5       | -6.0       | -7.0   | -5.3    | -7.3     | -5.9        | -5.9          | -4.3          | -6.3          | Formosulide 1,3-Diene | CID_22298470  | -7.5          | -4.3          |               |                |                |       |     |       |  |
| 6  | 22  | 維他命A  | 萜類   | -7.5       | -7.0        | -6.2       | -5.6       | -7.1   | -5.5    | -7.2     | -5.4        | -5.9          | -4.7          | -6.4          | Vitamin A             | CID_445354    | -7.5          | -4.2          |               |                |                |       |     |       |  |
| 7  | 79  | 洋甲萜   | 萜類   | -7.1       | -7.0        | -6.0       | -5.3       | -7.1   | -6.1    | -6.2     | -5.2        | -6.0          | -4.1          | -6.5          | Beryl Baccate         | CID_3345      | -7.1          | -4.0          |               |                |                |       |     |       |  |
| 8  | 40  | 大西洋醇  | 萜類   | -6.9       | -7.0        | -6.3       | -5.8       | -7.3   | -4.8    | -6.7     | -5.0        | -5.9          | -3.8          | -5.7          | alpha-Bisabolol       | CID_12298688  | -7.3          | -5.9          |               |                |                |       |     |       |  |
| 9  | 14  | 迷迭香   | 萜類   | -6.9       | -7.1        | -5.6       | -5.4       | -7.4   | -4.9    | -6.5     | -4.7        | -5.4          | -4.2          | -6.1          | 1,8-cineole           | CID_3033866   | -7.4          | -5.8          |               |                |                |       |     |       |  |
| 10 | 41  | 檸檬醛   | 萜類   | -6.3       | -7.1        | -5.8       | -5.2       | -6.3   | -4.9    | -6.7     | -5.6        | -4.9          | -4.0          | -6.6          | Valerone              | CID_174355    | -7.1          | -5.8          |               |                |                |       |     |       |  |
| 11 | 50  | 迷迭香   | 萜類   | -6.5       | -6.9        | -5.8       | -5.0       | -6.5   | -4.9    | -6.8     | -5.0        | -5.7          | -4.3          | -6.0          | alpha-bisabolol       | CID_442343    | -6.9          | -5.8          |               |                |                |       |     |       |  |
| 12 | 62  | 檸檬醛   | 萜類   | -6.5       | -6.5        | -6.0       | -5.4       | -6.8   | -4.7    | -6.7     | -5.6        | -5.1          | -4.1          | -5.9          | Valerone              | CID_6440942   | -6.8          | -5.8          |               |                |                |       |     |       |  |
| 13 | 54  | 薄荷醇   | 萜類   | -6.4       | -6.4        | -5.6       | -5.2       | -6.6   | -4.7    | -6.6     | -5.7        | -4.8          | -4.2          | -6.4          | isobornyl alcohol     | CID_10955174  | -6.4          | -5.7          |               |                |                |       |     |       |  |
| 14 | 51  | 檸檬醛   | 萜類   | -6.5       | -7.2        | -6.0       | -5.2       | -5.9   | -4.9    | -6.5     | -5.2        | -5.1          | -3.8          | -5.5          | alpha-terpineol       | CID_11085337  | -7.2          | -5.6          |               |                |                |       |     |       |  |
| 15 | 49  | 檸檬醛   | 萜類   | -6.4       | -5.9        | -5.4       | -5.7       | -6.8   | -5.3    | -6.0     | -4.9        | -5.8          | -3.7          | -5.6          | isobornyl alcohol     | CID_3611      | -6.4          | -5.6          |               |                |                |       |     |       |  |
| 16 | 21  | 檸檬醛   | 萜類   | -6.1       | -6.5        | -5.9       | -5.2       | -6.1   | -5.1    | -6.4     | -5.4        | -5.2          | -3.7          | -5.5          | Carvone               | CID_12305301  | -6.5          | -5.8          |               |                |                |       |     |       |  |
| 17 | 3   | 檸檬醛   | 萜類   | -6.4       | -6.1        | -5.1       | -5.1       | -6.7   | -4.7    | -5.8     | -4.8        | -5.3          | -4.2          | -6.2          | Capillone             | CID_3083813   | -6.1          | -5.5          |               |                |                |       |     |       |  |
| 18 | 37  | 檸檬醛   | 萜類   | -5.9       | -6.5        | -5.9       | -5.0       | -5.9   | -4.9    | -6.2     | -4.9        | -5.2          | -3.8          | -5.7          | camphor               | CID_5368074   | -6.5          | -5.4          |               |                |                |       |     |       |  |
| 19 | 52  | 金盞花   | 萜類   | -6.2       | -6.0        | -5.6       | -4.9       | -6.2   | -4.8    | -6.0     | -4.7        | -5.7          | -3.4          | -5.5          | linalool              | CID_4457070   | -6.2          | -5.4          |               |                |                |       |     |       |  |
| 20 | 75  | 野薔薇   | 萜類   | -6.0       | -5.7        | -4.8       | -5.7       | -6.4   | -4.7    | -6.0     | -5.1        | -5.4          | -3.6          | -5.5          | Carvone               | CID_10384     | -6.4          | -5.4          |               |                |                |       |     |       |  |

圖六、實驗三分子模擬對接能量平均值排序前 20 名精油成分二度空間溫度表

**實驗四步驟** 建立常見精油成分擴充版化學分子資料集

- (1) 參考精油圖鑑，選出13種台灣為主要產區之一，與17種台灣非主要產區，共30種常見精油及其所含主要化學成分及含量比例，比對實驗一加入未被蒐集到的化學成分，擴充精油成分化學分子數量至編號113，以Excel整理製作輸入精油名稱及其內含主要化學分子名稱。
- (2) 參照實驗一，完成常見精油成分擴充版化學結構資料集。

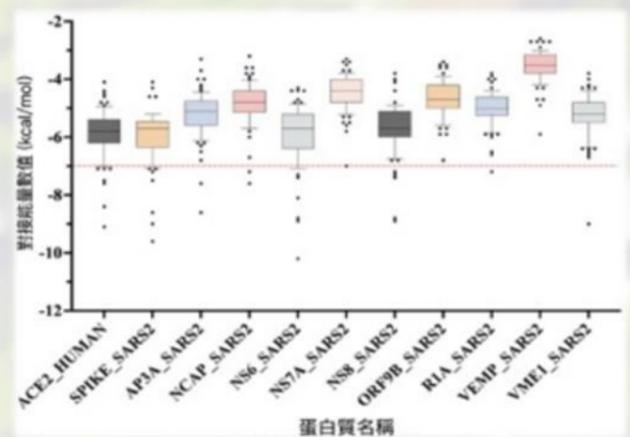
**實驗四結果** 為進一步提高生活應用性，參考精油圖鑑，篩選30種常見精油，列出其所含主要化學成分及含量比例，共擴充精油成分化學分子數量至編號113，編號86至113為新增的精油化學成分（圖八）。

每種精油皆含有許多不同的成分，有些化學分子可能為特定精油的成份精油中主要成分比例越高，表示該成分對於該精油的代表性越高，因此本研究以電腦程式結合分子模擬對接計算預測巨量數值，是很有效率又科學的做法。

圖八、常見精油成分資料集

**實驗五步驟** 使用電腦分子模擬對接技術，對應常見精油擴充版精油成分資料集，預測具新冠病毒防護力的潛力常見精油

- (1) 以Python程式，進行雙層巢狀迴圈之排列組合。第一層樣本為將實驗四中擴充版精油成分化學分子結構SDF檔案，與第二層樣本為實驗二11個蛋白質結構PDB檔案。
- (2) 使用AutoDock Vina進行雙層巢狀迴圈之排列組合，計算分子對接能量數值。
- (3) 比較與實驗三的結果差異，依據對接能量數值具強對接組合之常見精油成分，預測出有新冠病毒防護力的常見精油。
- (4) 選擇精油化學分子與蛋白質結構對接能量最低的組合，以PyMOL軟體繪製對接三度空間結構圖，視覺圖像化呈現分子對接模擬計算後，所預測到的對接位置。



圖七、精油化學分子與蛋白質結構分子模擬對接能量箱型圖。

**參考文獻資料**

- 保羅林肯 (2021) 人工智能破解蛋白質結構可能引發醫學革命 BBC 新聞網科學
- 溫佑君 (2018) 新精油圖鑑 300 種精油科研新知集成 商周出版 初版
- 維基百科 (2020) 分子對接 (macromolecular docking) 維基百科
- 全華圖書 (國一上) 第一冊 第二章 演算法與程式設計 及 第四章 資訊應用專題 資訊科技
- 翰林版 (國一下) 第三章 生物的演化與分類 自然科學
- 南一版 (國一下) 單元二 傳染病情報站、打擊傳染病 健康與體育
- 康軒版 (國二上) 第六章 探索物質組成 自然科學
- 林義傑 & 溫英華 (2014) 由基因序列的親疏設計流感疫苗探討 2014 年臺灣國際科學展覽會優勝作品專輯
- 衛生福利部疾病管制署 (2020) 第五類法定傳染病 <<嚴重特殊傳染性肺炎>> 疾病介紹

