

# 目 錄

第一章 前言	1
1.1 研究緣起	1
1.2 研究目的	3
第二章 文獻回顧	4
2.1 常用的毒性試驗物種	4
2.2 藻類毒性試驗	7
2.2.1 試驗物種簡介	7
2.2.2 藻類計數方法	7
2.2.3 藻類毒性試驗方式	9
2.2.4 試驗中的重要參數	11
2.3 有機物結構對毒性的影響	15
2.4 定量結構-活性關係 (QSAR)	16
2.5 QSAR 在環境毒理學上的應用	20
2.6 Surrogate 在環境毒理學上的應用	23
第三章 基本理論	25
3.1 毒性試驗終點種類	25
3.2 毒性預測模式	26
第四章 實驗設備與方法	28
4.1 實驗設備與材料	28
4.2 毒性試驗藻種	35
4.3 培養基質的配置	35
4.4 實驗前準備工作	37
4.5 實驗條件控制	37
4.6 實驗方法	39
4.7 實驗步驟	39
4.7.1 連續式母槽的培養	39
4.7.2 藻類毒性試驗	40
4.8 實驗的品保與品管	43
第五章 結果與討論	44
5.1 二十種有機毒物的試驗結果	44
5.2 二十種有機物毒性與物化參數的關係	48
5.3 二十種有機物毒性敏感性的比較	50

5.4	九十一種有機物的分類	54
5.5	基線毒性與其他毒性的比較	67
5.5.1	本研究所得到的基線毒性	67
5.5.2	基線毒性的 outliers	67
5.5.3	基線毒性中不屬於 Non polar narcosis 的有機物	69
5.6	各類有機物的相對毒性	71
5.6.1	超額毒性 (Excess toxicity)	71
5.6.2	月芽藻對有機物毒性的容忍範圍	72
5.7	有機物毒性與物化參數的關係	78
5.7.1	不同毒性機制下的毒性與單一物化參數的關係	78
5.7.2	不同毒性機制下的毒性與多種物化參數的關係	80
5.7.3	結構相似有機物毒性與單一物化參數的關係	82
5.7.3.1	酚類毒性與解離常數的關係	82
5.7.3.2	苯胺類毒性與蒸氣壓的關係	82
5.7.3.3	腈類毒性與 $E_{lum}$ 和 $E_{homo}$ 的關係	82
5.7.3.4	氯酚類毒性與log P的關係	83
5.7.4	有機物結構與毒性的關係	88
5.8	毒性試驗敏感度的比較	90
5.8.1	月芽藻毒性試驗之間的敏感性	90
5.8.2	本研究方法與其他毒性試驗方法的比較	94
5.8.2.1	有機物種類與敏感性的關係	94
5.8.2.2	Surrogate	96
5.8.2.3	影響敏感性差異的因素	99
第六章	結論與建議	103
6.1	結論	103
6.2	建議	107
第七章	參考文獻	108
附錄一	二十種有機物毒性試驗原始數據	124
附錄二	九十一種有機物化學結構式	145

# 表 目 錄

表 2.1 QSAR 分析中的 outliers 毒性機制分類表	21
表 3.1 Probit 容忍度分佈公式	27
表 4.1.1 Aromatics 毒物列表	33
表 4.1.2 Aliphatics 毒物列表	34
表 4.3.1 藻類營養基質巨量營養成份	36
表 4.3.2 藻類營養基質微量營養成份	36
表 5.1 二十種有機物毒性試驗結果	45
表 5.2.1 硝基酚類的毒性與 log P 和 pKa	49
表 5.2.2 本研究中的脂肪族毒性與四種 solute descriptors	50
表 5.3.1 本研究與其他物種毒性試驗數據	51
表 5.3.2 本研究與 green algae 和 ciliate 毒性試驗結果	53
表 5.4.1 Polar narcosis 有機物之毒性試驗結果與物化參數	55
表 5.4.2 Non polar narcosis 有機物之毒性試驗結果與物化參數	58
表 5.4.3 Oxidative phosphorylation uncoupling 有機物之 毒性試驗結果與物化參數	63
表 5.4.4 Electrophilic/Proelectrophilic 有機物之 毒性試驗結果與物化參數	64
表 5.5.5 Respiratory inhibition 有機物之毒性試驗結果與物化參數	66
表 5.6.1 九十一種毒物的 $EC_{10}$ 、 $EC_{50}$ 、log Te、log ACR	73
表 5.6.2 各類毒物之間的相對毒性排名	77
表 5.7.1 各種毒性機制毒性與單一物化參數之間回歸關係	79
表 5.7.2 各種毒性機制毒性同時與多物化參數之間回歸關係	81
表 5.7.3.1 酚類毒性與解離常數和 log P	84
表 5.7.3.2 苯胺類毒性與蒸氣壓	85
表 5.7.3.3 腈類毒性與 $E_{lumo}$ 和 $E_{homo}$	86
表 5.7.3.4 氯酚類毒性與 log P	87
表 5.8.1 本研究與其他物種實驗數據	91
表 5.8.2.1 有機物種類與最敏感物種數量統計	95
表 5.8.2.2 closed bottle test 與 water flea 對苯胺類的試驗結果與 log P	95
表 5.8.2.3 本研究結果與其他物種對毒性機制的回歸關係	98
表 5.8.2.4 氯乙烷 $\Delta \log(1/EC_{50})$ 與亨利常數	100
表 5.8.2.5 closed bottle test 與文獻中的毒性差異與蒸氣壓	101
表 5.8.2.6 毒性機制對於 closed bottle 與文獻中的毒性差異	102

# 圖目錄

圖 2.1 毒性機制分類圖	20
圖 3.1 點型的毒性試驗劑量反應曲線	26
圖 4.7 密閉式藻類毒性試驗流程暨裝置示意圖	42
圖 5.1.1 二十種有機物毒性與 log P 的關係	47
圖 5.1.2 氯烷類和氯烯類與 log P 的關係	47
圖 5.2.1 硝基酚類毒性 based on DO 與 log P 的關係	49
圖 5.2.2 硝基酚類毒性 based on DO 與 pKa 的關係	49
圖 5.2.3 硝基酚類毒性 based on growth rate 與 log P 的關係	49
圖 5.2.4 硝基酚類毒性 based on growth rate 與 pKa 的關係	49
圖 5.3.1 本研究以 DO 為試驗終點與其他物種毒性試驗結果關係圖	52
圖 5.3.2 本研究以 growth rate 為試驗終點與其他物種毒性試驗結果關係圖	52
圖 5.3.3 本研究與 green algae 相關性比較圖	53
圖 5.3.4 本研究與 ciliate 相關性比較圖	53
圖 5.5.1 Non polar narcosis 的 log P 與 log(1/EC <sub>50</sub> ) on final yield 關係圖	70
圖 5.5.2 毒性作用機制與 baseline toxicity 關係圖	70
圖 5.6.1 各類有機物的 log Te 和 log ACR	76
圖 5.7.3.1 酚類毒性與解離常數回歸關係圖	84
圖 5.7.3.2 酚類毒性與 pKa 的關係	84
圖 5.7.3.3 苯胺類毒性與蒸氣壓回歸關係圖	85
圖 5.7.3.4 腈類毒性與 E <sub>lumo</sub> 和 E <sub>homo</sub> 回歸關係圖	86
圖 5.7.3.5 七種氯酚類毒性與 log P 回歸關係圖	87
圖 5.8.2.1 closed bottle test 與其他物種的 毒性試驗結果關係圖	97
圖 5.8.2.2 氯乙烷 delta log(1/EC <sub>50</sub> ) 與亨利常數關係圖	100