

目錄

表次	頁次
中文摘要.....	I
英文摘要.....	II
誌謝.....	III
目錄.....	IV
表目錄.....	VII
圖目錄.....	IX
符號表.....	XII

第一章 緒論

1.1 研究源起.....	1
1.2 研究目的.....	2
1.3 研究架構.....	2



第二章 文獻回顧

2.1 PAHs 性質之介紹.....	5
2.1.1 PAHs 來源與形成機制.....	5
2.1.2 PAHs 之物理性質.....	7
2.1.3 PAHs 之化學性質.....	7
2.1.4 PAHs 之生物性質.....	8
2.2 PAHs 之毒理特性及對生物體之危害.....	10
2.3 特定生物對 PAHs 之分解作用.....	12
2.4 紫外光(UV 光)之種類及對 PAHs 之光解效應.....	13
2.5 PAHs 之光誘導毒性.....	13
2.6 QSAR 預測光毒及其機制.....	14

2.6.1 QSAR 基本理論.....	14
2.6.2 QSAR 預測 PAHs 光毒.....	15
2.7 藻類毒性試驗.....	18
2.7.1 藻類毒性試驗標準方法.....	18
2.7.2 連續式、批次式與密閉式藻類毒性試驗.....	18
2.7.3 毒性試驗物種.....	21
2.7.4 藻類生長參數.....	22

第三章 基本理論

3.1 PAHs 之光降解機制.....	23
3.2 劑量反應模式.....	24
3.2.1 毒性物質劑量-反應模式.....	24
3.3 基本生長動力學.....	25

第四章 實驗設備與實驗方法

4.1 儀器設備與藥品.....	27
4.2 試驗藻種.....	34
4.3 培養基質之配製.....	35
4.4 試驗毒物.....	37
4.5 試驗前準備.....	37
4.6 試驗條件之控制與處理組濃度之訂定.....	40
4.7 試驗步驟.....	41
4.7.1 連續式母槽之培養.....	41
4.7.2 藻類毒性試驗.....	43
4.7.3 HPLC 分析方法.....	44
4.8 光照條件設計.....	46
4.9 溶氧測定儀之使用與校正.....	47

第五章 結果與討論

5.1 藻類毒性試驗數據.....	49
5.2 PAHs 之光解與光誘導毒性效應.....	68
5.2.1 PAHs 光解現象討論.....	68
5.2.2 光照前後 PAHs 劑量反應曲線比較.....	78
5.3 最佳化模式選擇.....	85
5.4 EC10 與 NOEC 之比較.....	89
5.5 PAHs 之 QSAR.....	94
5.5.1 QSAR 預測 PAHs 之光誘導毒性.....	94
5.5.2 其他參數建立之 QSAR.....	99
5.6 藻類與其他毒性試驗物種比較.....	103

第六章 結論與建議

6.1 結論.....	110
6.2 建議.....	112



參考文獻	113
------------	-----

附錄一	122
-----------	-----

附錄二	144
-----------	-----

表目錄

表 2.1.1 本研究之 PAHs 物化特性.....	9
表 2.2.1 PAHs 之毒理特性.....	11
表 2.6.1 文獻中 QSAR 預測光毒性之比較.....	17
表 2.7.1 批次式與連續式藻類毒性試驗之優缺點比較.....	20
表 4.1.1 HPLC 設備與分析條件.....	33
表 4.3.1 藻類營養基質之巨量營養組成份.....	36
表 4.3.2 藻類營養基質之微量營養組成份.....	36
表 4.5.1 電子計數器設定之條件.....	39
表 5.1.1 Acridine 光照前之原始實驗數據.....	52
表 5.1.2 光照前試驗毒物之藻類毒性試驗數據.....	53
表 5.1.3 光照後試驗毒物之藻類毒性試驗數據.....	53
表 5.2.1 光照前後化合物圖譜波峰面積變化及殘留面積百分比.....	69
表 5.3.1 光照前以 DO 為試驗終點三種模式 G value.....	86
表 5.3.2 光照前以 Final Yield 為試驗終點三種模式 G value.....	86
表 5.3.3 光照前以 Growth Rate 為試驗終點三種模式 G value.....	87
表 5.3.4 光照後以 DO 為試驗終點三種模式 G value.....	87
表 5.3.5 光照後以 Final Yield 為試驗終點三種模式 G value.....	88
表 5.3.6 光照後以 Growth Rate 為試驗終點三種模式 G value.....	88
表 5.4.1 以 Dunnett's Test 分析光照前之 NOEC 值.....	92
表 5.4.2 以 Dunnett's Test 分析光照後之 NOEC 值.....	92
表 5.4.3 光照前三種試驗終點之重要統計參數.....	93
表 5.4.4 光照後三種試驗終點之重要統計參數.....	93
表 5.5.1 QSAR 預測光毒性重要參數.....	97

表 5.5.2 QSAR 在三種試驗終點下預測光毒性之實驗值與預測值比較...	99
表 5.5.3 QSAR 分析參數.....	101
表 5.6.1 藻類毒性試驗數據與其他藻種、水蚤、草蝦之數據比較.....	105
表 5.6.2 藻類毒性試驗數據與其他蚯蚓、螢光菌、魚類之數據比較.....	105



圖目錄

圖 1.3.1	實驗架構圖.....	3
圖 2.6.1	光毒鐘型曲線.....	16
圖 3.1.1	PAHs 分子吸收能量變化流程圖.....	23
圖 4.2.1	月芽藻圖鑑.....	34
圖 4.7.1	連續式藻類培養裝置圖.....	42
圖 4.7.2	藻類毒性試驗流程圖.....	44
圖 4.7.3	HPLC 分析流程.....	45
圖 5.1.1	光照前後毒性強弱比較圖(based on DO).....	54
圖 5.1.2	光照前後毒性強弱比較圖(based on FY).....	54
圖 5.1.3	光照前後毒性強弱比較圖(based on GR).....	55
圖 5.1.4	三種試驗終點下 Ben 之劑量反應曲線.....	56
圖 5.1.5	三種試驗終點下 UVB-Ben 之劑量反應曲線.....	56
圖 5.1.6	三種試驗終點下 Phe 之劑量反應曲線.....	57
圖 5.1.7	三種試驗終點下 UVA-Phe 之劑量反應曲線.....	57
圖 5.1.8	三種試驗終點下 Flu 之劑量反應曲線.....	58
圖 5.1.9	三種試驗終點下 UVB-Flu 之劑量反應曲線.....	58
圖 5.1.10	三種試驗終點下 Ant 之劑量反應曲線.....	59
圖 5.1.11	三種試驗終點下 UVB-Ant 之劑量反應曲線.....	59
圖 5.1.12	三種試驗終點下 B[a]A 之劑量反應曲線.....	60
圖 5.1.13	三種試驗終點下 UVB-B[a]A 之劑量反應曲線.....	60
圖 5.1.14	三種試驗終點下 Acr 之劑量反應曲線.....	61
圖 5.1.15	三種試驗終點下 UVB-Acr 之劑量反應曲線.....	61
圖 5.1.16	三種試驗終點下 B[b]f 之劑量反應曲線.....	62

圖 5.1.17 三種試驗終點下 UVB-B[b]f 之劑量反應曲線.....	62
圖 5.1.18 三種試驗終點下 D[b,i]a 之劑量反應曲線.....	63
圖 5.1.19 三種試驗終點下 UVA-D[b,i]a 之劑量反應曲線.....	63
圖 5.1.20 三種試驗終點下 Per 之劑量反應曲線.....	64
圖 5.1.21 三種試驗終點下 UVA-Per 之劑量反應曲線.....	64
圖 5.1.22 三種試驗終點下 B[b]c 之劑量反應曲線.....	65
圖 5.1.23 三種試驗終點下 UVA-B[b]c 之劑量反應曲線.....	65
圖 5.1.24 三種試驗終點下 Nap 之劑量反應曲線.....	66
圖 5.1.25 三種試驗終點下 UVA-Nap 之劑量反應曲線.....	66
圖 5.1.26 DO與FY試驗終點之EC ₅₀ 相關性分析.....	67
圖 5.1.27 DO與GR試驗終點之EC ₅₀ 相關性分析.....	67
圖 5.1.28 FY與GR試驗終點之EC ₅₀ 相關性分析.....	67
圖 5.2.1 UVB 光照前後 Benzanthrone 之波峰變化圖.....	70
圖 5.2.2 UVA 光照前後 Phenanthrene 之波峰變化圖.....	71
圖 5.2.3 UVB 光照前後 Fluoranthene 之波峰變化圖.....	72
圖 5.2.4 UVB 光照前後 Anthracene 之波峰變化圖.....	73
圖 5.2.5 UVB 光照前後 Benzo[a]anthracene 之波峰變化圖.....	74
圖 5.2.6 UVB 光照前後 Acridine 之波峰變化圖.....	75
圖 5.2.7 UVA 光照前後 Perylene 之波峰變化圖.....	76
圖 5.2.8 UVA 光照前後 Napthalene 之波峰變化圖.....	77
圖 5.2.9 Anthracene 光照前後對藻類 DO 之劑量反應曲線比較.....	79
圖 5.2.10 Anthracene 光照前後對藻類 FY 之劑量反應曲線比較.....	79
圖 5.2.11 Anthracene 光照前後對藻類 GR 之劑量反應曲線比較.....	79
圖 5.2.12 Acridine 光照前後對藻類 DO 之劑量反應曲線比較.....	80
圖 5.2.13 Acridine 光照前後對藻類 FY 之劑量反應曲線比較.....	80
圖 5.2.14 Acridine 光照前後對藻類 GR 之劑量反應曲線比較.....	80
圖 5.2.15 B[a]A 光照前後對藻類 DO 之劑量反應曲線比較.....	81

圖 5.2.16 B[a]A 光照前後對藻類 FY 之劑量反應曲線比較.....	81
圖 5.2.17 B[a]A 光照前後對藻類 GR 之劑量反應曲線比較.....	81
圖 5.2.18 Flu 光照前後對藻類 DO 之劑量反應曲線比較.....	82
圖 5.2.19 Flu 光照前後對藻類 FY 之劑量反應曲線比較.....	82
圖 5.2.20 Flu 光照前後對藻類 GR 之劑量反應曲線比較.....	82
圖 5.2.21 Ben 光照前後對藻類 DO 之劑量反應曲線比較.....	83
圖 5.2.22 Ben 光照前後對藻類 FY 之劑量反應曲線比較.....	83
圖 5.2.23 Ben 光照前後對藻類 GR 之劑量反應曲線比較.....	83
圖 5.2.24 Perylene 光照前後對藻類 DO 之劑量反應曲線比較.....	84
圖 5.2.25 Perylene 光照前後對藻類 FY 之劑量反應曲線比較.....	84
圖 5.2.26 Perylene 光照前後對藻類 GR 之劑量反應曲線比較.....	84
圖 5.5.1 QSAR 預測 PAHs 光誘導毒性(based on DO).....	97
圖 5.5.2 QSAR 預測 PAHs 光誘導毒性(based on FY).....	98
圖 5.5.3 QSAR 預測 PAHs 光誘導毒性(based on GR).....	98
圖 5.5.4 去除outlier後LogP對Log(1/EC ₅₀) on DO關係圖.....	101
圖 5.5.5 去除outlier後LogP對Log(1/EC ₅₀) on FY關係圖.....	102
圖 5.5.6 去除outlier後LogP對Log(1/EC ₅₀) on GR關係圖.....	102
圖 5.6.1 以 DO 為試驗終點之 BOD test 與 <i>S.subspicatus</i> 試驗之關係圖	106
圖 5.6.2 以 FY 為試驗終點之 BOD test 與 <i>S.subspicatus</i> 試驗之關係圖	106
圖 5.6.3 以 FY 為試驗終點之 BOD test 與 <i>Fathead minnow</i> 試驗關係圖	107
圖 5.6.4 以 GR 為試驗終點之 BOD test 與 <i>Fathead minnow</i> 試驗關係圖	107
圖 5.6.5 以 DO 為試驗終點之 BOD test 與 <i>Daphnia magna</i> 試驗關係圖	108
圖 5.6.6 以 FY 為試驗終點之 BOD test 與 <i>Daphnia magna</i> 試驗關係圖	108
圖 5.6.7 以 DO 為試驗終點之 BOD test 與 <i>Rainbow trout</i> 試驗關係圖...	109
圖 5.6.8 以 FY 為試驗終點之 BOD test 與 <i>Rainbow trout</i> 試驗之關係圖	109

符號表

符號	英文說明	中文說明	單位
C.V.	Coefficient of Variation	變異係數	%
DO	Dissolve Oxygen	溶液中之溶氧量	mg/l
ΔDO	Delta Dissolve Oxygen	溶液中溶氧之增加量	mg/l
FY	Final Yield	藻細胞最終產量	cells/ml
GR	Growth Rate	藻細胞生長率	
EC X	X % Effect Concentration	引起 X % 半致死效應之濃度	mg/l
Log P	n-Octanol/Water Partition Coefficient	辛醇-水係數之 log 值	-
MCV	Mean Cell Volume	藻類細胞之平均細胞體積	μm ³ /cell
NOEC	No Observation Effect Concentration	對受測物種未造成明顯毒性反應之最高濃度	mg/l
-	No Data	沒有數據	-
Elumo	Energy of lowest unoccupied molecular orbit	分子最低空軌域能量	hartree
Ehomo	Energy of highest occupied molecular orbit	分子最高佔有軌域能量	