

第三章、基本理論

3.1 PAHs 之光降解機制

分子吸收光子時，低能階電子得到外加能量使其激發至高能階軌道，若此電子激發之軌道上含有化合物的建結時，由於電子轉移而使化學鍵結斷鍵^[44]。光化學分解可分為直接光解(direct photolysis)及間接光解(indirect photolysis)，其機制如下：

- (1)直接光解：物質吸收光能後至激發態，自行化學反應而分解。
- (2)間接光解：在化學反應中加入光敏感物質(photosensitizer)，它可吸收光能後至激發態產生氫氧自由基(OH·)，自由基和有機物作用使得有機物斷鍵造成光降解反應^[45]。

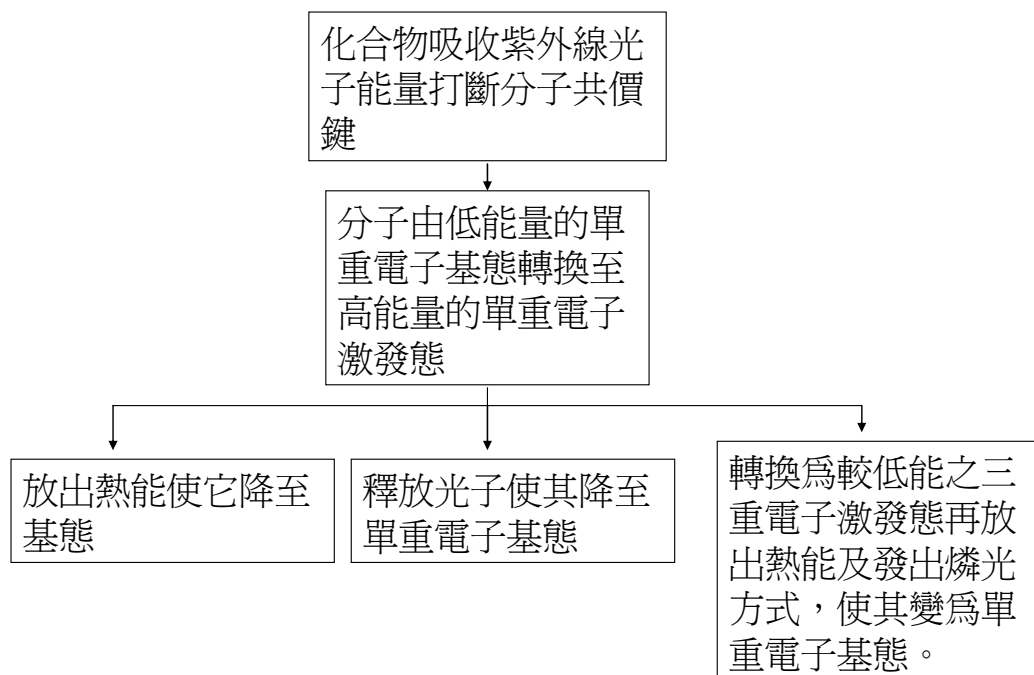


圖 3.1.1 PAHs 分子吸收光能量變化流程圖

3.2 劑量反應模式

3.2.1 毒性物質劑量-反應模式

當受測試生物受到毒性物質作用時，所受影響或死亡之百分率，會隨著毒性物質濃度成S型曲線關係，稱為劑量反應關係，若在毒性試驗過程中，受測生物受毒性影響造成 50% 抑制或死亡，則稱為EC₅₀ (Effect Concentration) 或LC₅₀ (Lethal Concentration)。欲從S型曲線求得EC₅₀或EC₁₀並不容易，因此必須藉由數學關係式將S型轉為直線型以便求取，此種數學轉換模式便稱為劑量反應關係模式，一般常見的毒性物質劑量-反應模式為Probit、Weibull及Logit三種模式，皆依據不同的假設發展而成，其基本理論如下：

(1) Probit 模式：為最常用的劑量-反應模式，除了一些理論基礎外，主要是由實驗經驗所得的一個模式，其係假設生物對毒性物質的容忍度分布為常態分布(Log-normal distribution)，其主要以毒性物質濃度之 log 值與反應率之 NED(Normal equivalent deviation)具有線性關係為基礎，其中反應率即測試生物對毒性物質之反應比率（如死亡率等）。此模式將劑量-反應模式之 S 型曲線，轉換成 NED 尺度上的一直線，而 NEDscale 之座標值加 5 即為 Probit 的縱座標，Probit 單位與反應率與毒性物質劑量間之轉換關係如下：

$$Y=A+B\log Z \quad (1)$$

$$P=0.5\left[1+\operatorname{erf}\left(\frac{Y-5}{\sqrt{2}}\right)\right] \quad (2)$$

其中 Y 為 Probit 單位，A、B 為劑量-反應曲線之截距與斜率，Z 為毒性物質劑量濃度（單位：mg/l）<P 為測試物種對毒性物質之反應率（如死亡率等，單位：%），erf 為 error function。

- (2) Weibull：為機率-反應機制基礎（Mechanistic-Probability basis）模式，發展根據毒性物質分子與受測試生物之受體分子間化學鍵關係所推演而來，logit 模式相同皆假設毒性物質會在生物體內受體產生化反應。
- (3) Logit：由人口成長研究所發展而出的另一種模式，描述毒性反應中的某種酵素反應(Enzyme Reaction)，適用於自催化(autocatalysis)之化學反應。

3.3 基本生長動力學

在批次式藻類培養中，單細胞藻類的生長通常依循簡單的一階動力學：


$$\frac{dX}{dt} = \mu X$$

其中，X 為生物質量（一般以乾重或是細胞數表示之）； μ 為比生長率；t 為時間。影響生長率之因子有光照、溫度、營養鹽及碳源之供應，如果光照、營養鹽或碳源受到限制，則藻類之基本生長模式將由指數型態變成直線型態。

在連續式藻類培養中，當系統達到一平衡（Steady State）時：

一、由反應槽中生物質量之平衡可得下列式子：

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - DX = (\mu - D) X$$

其中，D 為稀釋率（ day^{-1} ）即入流量與反應槽體積之比值，當系統達到平衡穩定狀態時，

$$\frac{dX}{dt} = 0$$

則 $\mu = D$

此表示當反應槽達到平衡穩定狀態時，反應槽內生物之生長率即為該系統之稀釋率。

二、由反應槽內之基質平衡可得下式：

$$\frac{dS}{dt} = DS_0 - DS - \mu \left(\frac{X}{Y} \right)$$

其中， S_0 為入流基質濃度 (mg/l)； S 為系統達平衡穩定狀態時，限制性基質之濃度 (mg/l)； X 為系統達平衡穩定狀態時，生物質量之密度 (cells/ml)； Y 為無因次之生長係數。

當系統達平衡時，

$$\frac{dS}{dt} = 0$$

$$\text{則 } D(S_0 - S) = \mu \left(\frac{X}{Y} \right)$$

$$\text{又 } \mu = D$$

$$\text{所以 } X = Y(S_0 - S)$$

$$\text{再由 Monod's equation, } \mu = \frac{\mu_{\max} S}{(K_s + S)}$$

$$\text{及 } \mu = D$$

$$\text{所以 } S = \frac{K_s D}{(\mu_{\max} - D)}$$

其中， μ 為比生長率； μ_{\max} 為最大比生長率； K_s 為飽和常數（比生長率為最大比生長率一半時之基質濃度）。

最後可得

$$X = Y \left[\frac{S_0 - K_s D}{(\mu_{\max} - D)} \right]$$

由此是可知當反應槽達平衡穩定狀態時，其生物量可由稀釋率及進流基質濃度來控制。