


第五章、結果與討論

5.1 藻類毒性試驗數據

本實驗主要是針對具有不同程度揮發性的除草劑，經由密閉式的藻類毒性試驗的方法，分別量測實驗前後的溶氧與細胞密度變化量，作為反應終點，並利用求得的數據，以溶氧增加量(ΔDO)、生物質量(Biomass, Final Yield)及生長率(Growth rate)作為實驗參數，求得毒性物質的 EC_{50} 值和劑量反應曲線。



由於試驗所選擇的毒性物質多為半揮發性有機物，在實驗時為了避免於儲存階段經由揮發所造成的誤差，因此，在進行毒性試驗之前必須先以HPLC進行濃度的定量分析。Table 5.1.1是以desmetryne為測試毒物之實驗原始數據，為試驗三重複下的平均值，表格的前半部乃使用溶氧測定儀與顆粒計數器所測得的溶氧值與細胞數；後半部則是利用公式計算後所求得各參數之抑制率。本研究的每一毒性試驗皆是設定1個控制組及6個不同濃度的處理組(除了monolinuron之外)，隨著濃度增加，毒性物質對於藻類的生長抑制情況也愈趨明顯；以溶氧增加量而言，毒性物質濃度由0.002 mg/L上升至0.04 mg/L，DO的抑制率也由14%增加到100%，Final Yield抑制率由8%增加至90%，Growth rate抑制率由3%上升至70%。

在將經過計算後的數值代入Probit模式中，求得描繪劑量反應曲線圖所需之斜率(β)與截距(α)，另外還可求得各個參數的 EC_{50} 值。最後將此二值(α , β)代入程式中，即可畫出以毒物濃度為橫軸，抑制率為

縱軸的劑量反應曲線，如 Fig 5.1.1 至 Fig 5.1.20。由圖中的曲線顯示狀況可以檢查實驗的數據是否為一良好、準確的劑量反應關係。

接下來的 Table 5.1.2 至 Table 5.1.4 是以不同除草劑經由 Probit 模式分析藻類毒性試驗所得到的數據。就所得到的結果來看，先以溶氧變化量作為反應參數來比較的話，屬於 C1 類的 desmetryne 為毒性最強的毒物 ($EC_{50} = 0.0056$ mg/L)，毒性最弱的除草劑為 O 類的 dicamba ($EC_{50} = 21.421$ mg/L)；若以 Final Yield 為反應參數時，毒性最強的除草劑為 C1 類的 bromacil ($EC_{50} = 0.0065$ mg/L)，而 dicamba 仍為較不毒的除草劑 ($EC_{50} = 18.213$ mg/L)；當以 Growth rate 為反應參數的情況下，K3 類的 dimethachlor 為毒性最高的化合物 ($EC_{50} = 0.0176$ mg/L)，dicamba 的毒性仍是最低的 ($EC_{50} = 23.982$ mg/L)。可以發現到，不同參數下所表現出的敏感度在毒性濃度愈低時，差異性愈大，對於毒性較弱，濃度較高的除草劑，三種反應參數的敏感性之間反而沒有明顯的差別（除了 clopyralid 之外）。

將不同參數的數據比較之後，可察覺到普遍以 Final Yield 為參數時所得到的 EC_{50} 值較為敏感（佔 75%），其次是 ΔDO （佔 25%），而由 Growth rate 所得到數據呈現出來的，則是屬於敏感性最低的參數。Yeh⁽⁶⁹⁾ 在以農藥為毒性物質所作的藻類毒性試驗中，也是以 Final Yield 為敏感的參數，Growth rate 則是最不敏感，和本試驗結果相同。

Fig 5.1.1 至 Fig 5.1.20 則為本研究選擇的除草劑所作出之劑量反應曲線圖，由圖形中所得到的曲線斜率值約分佈在 1.015 - 3.802 之間（除了 dicamba 和 chloramben），相差約近 3 倍左右。不過如果和 dicamba 及 chloramben 相比的話，則後兩者的斜率明顯高出許多，圖形中曲線也呈現較陡峭的情形。在此表現出斜率高，表示生物體所能忍受的最高濃度到完全抑制濃度只存在狹小的區間內；這個情況當中，若濃度上有稍加變化，

生物受體的反應就會大幅的增加，這樣的情形在實驗濃度數據的處理方面則需多加注意。

若是以不同類別的除草劑來觀察結果，針對三種不同的參數來比較，C 類和 K 類的除草劑分別有 1/3 的毒性物質是呈現 Δ DO 參數比較敏感，2/3 是以 Final Yield 為參數是敏感性最高的，而 O 類的除草劑皆是 Final Yield 較敏感。

這個結果和當初選擇 C、K、O 三類除草劑的假設並不相同。C 類是抑制光合作用系統型的作用機制，起初假設可能和溶氧的變化關係較為明顯，但是實驗結果卻僅有三分之一的除草劑在 Δ DO 這個參數所呈現出的敏感性較高；其餘的毒性物質仍是以 Final Yield 參數較好。顯示 C 類除草劑雖是抑制光合作用為主，產生的氧氣量的確會受到明顯的影響。但是，無法行完整的光合作用將會導致植物生長所需的能量不足，也可能是造成細胞分裂無法完全的原因。於是，在細胞密度變化量的反應參數上表現出特殊的敏感性，比起原本假設中的情況高出了許多。

而 K 類和 O 類除草劑的作用機制原本就和細胞分裂有關，因此在以 Final Yield 為反應參數時會呈現較高的敏感度是可以預期的，本實驗研究結果也証實了這項假設。尤其是 O 類除草劑中，屬於同一化學結構分類 (Pyridine carboxylic acids) 下的 clopyrild、picloram 及 triclopyr 三者的 Final Yield 參數敏感性明顯較其它反應參數要高出許多。

若是以組別間的毒性來討論的話，C1 類組間的毒性差異並不大，不過 C2 類間確有了明顯的不同（以 Δ DO 來說，fenuron 和 ethidimuron 差了 20 倍）。C3 類的 bentazone 並不高，是所有 C 類中毒性最低的，和 Fairchild *et al.*^[70]、Ma *et al.*^[1]、Reboud^[71]、Ma *et al.*^[72]，等利用不同藻種所做

出來的研究結果是相同的。K1 及 K2 類的毒性明顯較 K3 類來的低，其中 dimethachlor 的毒性更是比 tebutam 要高出 500 倍以上。O 類除草劑是本研究毒物中毒性最弱的，和 desmetryne 差了有 10^4 倍之多，主要有可能是此類型的除草劑是針對闊葉型植物來設計的，因此在以藻類為測試物種的毒性試驗上才比較難看出這類型除草劑的毒性。

Fig 5.1.22 中的 Eq.1、Eq.2、Eq.3 是依 Russom *et al.* ^[73]、Akers *et al.* ^[74] 和 Ramos *et al.* ^[75] 對毒性機制所做出的分類以及經由密閉式藻類毒性試驗 ^[76] 所得到的方程式。若是將本研究所做出的結果描繪在圖上 (Fig 5.1.22)，經由比較之後，可以發現到試驗所使用的 20 種除草劑多落於迴歸線的上方，顯示除草劑的毒性是屬於較 baseline toxicity 還來得高。



Table 5.1.1 The raw data of algal toxicity test about Desmetryne

Conc. mg/L	Initial DO mg/L	Final DO mg/L	Final cells cells/mL	Δ DO mg/L	μ specific	μ relative (growth rate)	IR	IR	IR
							(Biomass)	(DO)	
Control	0.95	7.25	199900	6.30	1.29	1	0	0	0
0.04	1.33	1.24	32566	-0.11	0.38	0.30	0.70	0.90	1.02
0.02	1.12	1.75	50866	0.63	0.61	0.47	0.53	0.81	0.90
0.01	0.93	2.53	87633	1.60	0.88	0.68	0.32	0.61	0.75
0.008	0.93	3.20	103033	2.27	0.96	0.74	0.26	0.52	0.64
0.0043	0.92	4.75	153600	3.83	1.16	0.90	0.10	0.25	0.39
0.002	0.93	6.34	184466	5.41	1.25	0.97	0.03	0.08	0.14

EC_{50} =0.0056 mg/L (DO)

EC_{50} =0.0080 mg/L (Final Yield)

EC_{50} =0.0191 mg/L (Growth Rate)

IR : Inhibition rate

Biomass : Yield f (Final yield based on cell density)

EC_{50} value is conducted by Probit model

Table 5.1.2 Median effective concentration values (EC_{50}) based on dissolved oxygen production

Group	Toxicants	Response based on ΔDO			
		EC_{50} (mg/L)	α	β	95% Confidence Limit
C1	desmetryne	0.0056	10.45	2.415	0.0053 ~ 0.0058
	hexazinone	0.0135	10.27	2.820	0.0107 ~ 0.0184
	metribuzin	0.0148	9.222	2.308	0.0129 ~ 0.0172
	bromacil	0.0082	8.993	1.916	0.0069 ~ 0.0098
C2	monolinuron	0.2102	6.317	1.945	0.1895 ~ 0.2318
	ethidimuron	0.0502	7.851	2.195	0.0426 ~ 0.0587
	fenuron	0.9697	5.031	2.315	0.7773 ~ 1.2037
	tebuthiuron	0.0538	6.837	1.447	0.0353 ~ 0.0821
C3	bentazon	1.0010	4.999	1.709	0.7685 ~ 1.3672
K1	oryzalin	0.0581	6.865	1.509	0.0267 ~ 0.1124
	propyzamide	0.8226	5.127	1.500	0.6613 ~ 1.0324
	tebutam	6.1828	3.161	2.324	4.3941 ~ 9.4386
K2	carbetamide	0.2239	5.794	1.222	0.1823 ~ 0.2676
K3	dimethachlor	0.0090	8.638	1.780	0.0070 ~ 0.0118
	propachlor	0.0172	9.096	2.323	0.0150 ~ 0.0197
O	dicamba	21.421	-5.019	7.529	19.248 ~ 24.292
	chloramben	14.003	-1.030	5.261	11.393 ~ 20.573
	clopyralid	16.005	3.574	1.185	8.7827 ~ 66.664
	picloram	8.6986	3.878	1.194	5.5190 ~ 17.410
	triclopyr	10.227	3.519	1.467	5.1545 ~ 46.944
	Acetonitrile*	6115.7	-4.938	2.625	4883.4 ~ 7958.1

α : The intercept of the Dose-response Curve

β : The slope of the Dose-response Curve

* Acetonitrile is used as a solvent

Table 5.1.3 Median effective concentration values (EC₅₀) based on Final Yield

Group	Toxicants	Response based on Final Yield			
		EC ₅₀ (mg/L)	α	β	95% Confidence Limit
C1	desmetryne	0.0080	9.561	2.174	0.0071 ~ 0.0089
	hexazinone	0.0158	9.972	2.762	0.0137 ~ 0.0192
	metribuzin	0.0125	8.854	2.024	0.0103 ~ 0.0152
	bromacil	0.0065	8.147	1.438	0.0055 ~ 0.0075
C2	monolinuron	0.3233	5.846	1.726	0.2780 ~ 0.3692
	ethidimuron	0.0454	8.398	2.531	0.0400 ~ 0.0515
	fenuron	0.6648	5.401	2.259	0.5292 ~ 0.8000
	tebuthiuron	0.0305	7.332	1.538	0.0235 ~ 0.0394
C3	bentazon	0.5628	5.378	1.514	0.4586 ~ 0.6886
K1	oryzalin	0.0371	7.060	1.441	0.0266 ~ 0.0484
	propyzamide	0.2817	2.787	1.429	0.1790 ~ 0.4063
	tebutam	4.5749	3.550	2.195	2.5192 ~ 8.7295
K2	carbetamide	0.9348	5.043	1.475	0.7777 ~ 1.1185
K3	dimethachlor	0.0083	9.841	2.328	0.0066 ~ 0.0105
	propachlor	0.0236	8.479	2.139	0.0192 ~ 0.0313
O	dicamba	18.213	-3.030	6.371	17.366 ~ 19.064
	chloramben	12.797	-1.309	5.699	10.111 ~ 18.429
	clopyralid	2.8346	4.541	1.015	1.6264 ~ 4.7974
	picloram	3.8616	4.070	1.584	1.8384 ~ 6.2702
	triclopyr	4.4241	3.832	1.808	2.6035 ~ 8.6581
	Acetonitrile*	5371.4	-7.699	3.404	3587.9 ~ 8100.9

α : The intercept of the Dose-response Curve

β : The slope of the Dose-response Curve

* Acetonitrile is used as a solvent

Table 5.1.4 Median effective concentration values (EC₅₀) based on Growth Rate

Group	Toxicants	Response based on Growth Rate			
		EC ₅₀ (mg/L)	α	β	95% Confidence Limit
C1	desmetryne	0.0191	8.056	1.777	0.0175 ~ 0.0208
	hexazinone	0.0240	11.16	3.802	0.0191 ~ 0.0387
	metribuzin	0.0327	7.303	1.550	0.0245 ~ 0.0425
	bromacil	0.0244	7.005	1.244	0.0193 ~ 0.0309
C2	monolinuron	0.9406	5.041	1.538	0.8583 ~ 1.0423
	ethidimuron	0.0930	7.532	2.454	0.0816 ~ 0.1082
	fenuron	1.5833	4.601	1.999	1.2724 ~ 2.0274
	tebuthiuron	0.0889	6.722	1.639	0.0676 ~ 0.1178
C3	bentazon	2.0791	4.587	1.298	1.8808 ~ 2.3039
K1	oryzalin	0.1451	6.121	1.337	0.1084 ~ 0.1954
	propyzamide	0.9324	5.046	1.502	0.6517 ~ 1.3392
	tebutam	8.3594	2.545	2.662	6.3512 ~ 13.268
K2	carbetamide	3.0223	4.317	1.422	2.5415 ~ 3.6958
K3	dimethachlor	0.0176	8.691	2.105	0.0150 ~ 0.0207
	propachlor	0.0429	8.491	2.552	0.0348 ~ 0.0548
O	dicamba	23.982	-3.832	6.401	23.104 ~ 24.882
	chloramben	15.565	-3.713	7.308	13.942 ~ 17.168
	clopyralid	13.303	3.749	1.113	7.9339 ~ 26.620
	picloram	11.271	3.403	1.518	7.0871 ~ 27.777
	triclopyr	8.2844	2.766	2.433	5.6775 ~ 12.341
	Acetonitrile*	8592.8	-7.163	3.092	7035.8 ~ 14169

α : The intercept of the Dose-response Curve

β : The slope of the Dose-response Curve

* Acetonitrile is used as a solvent

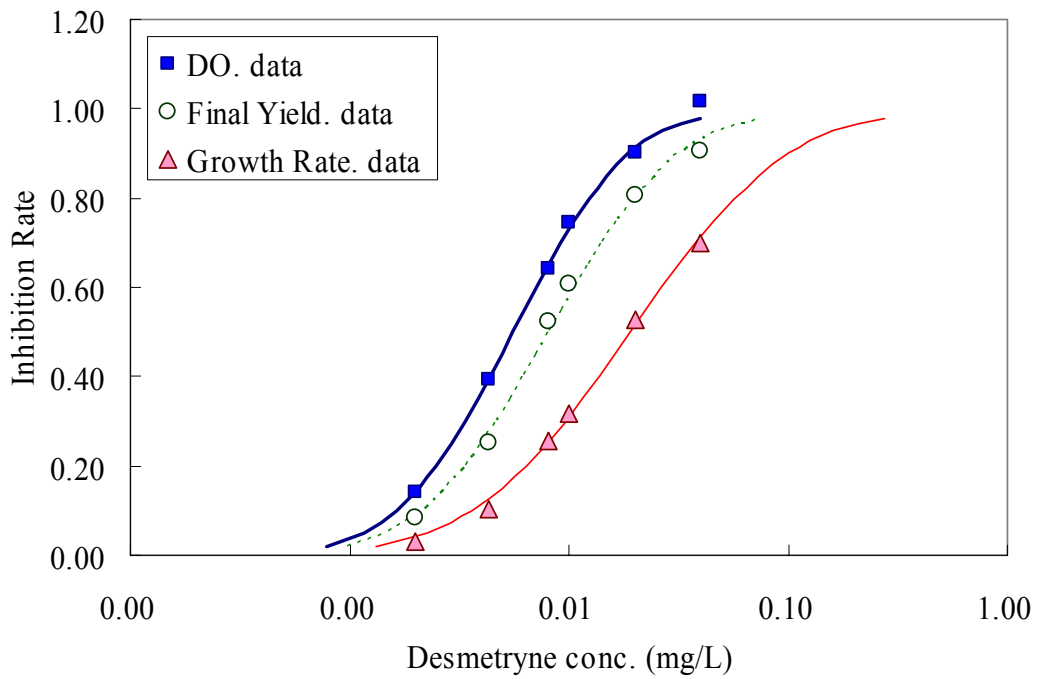


Fig 5.1.1 The Dose-response Curve of Desmetryne

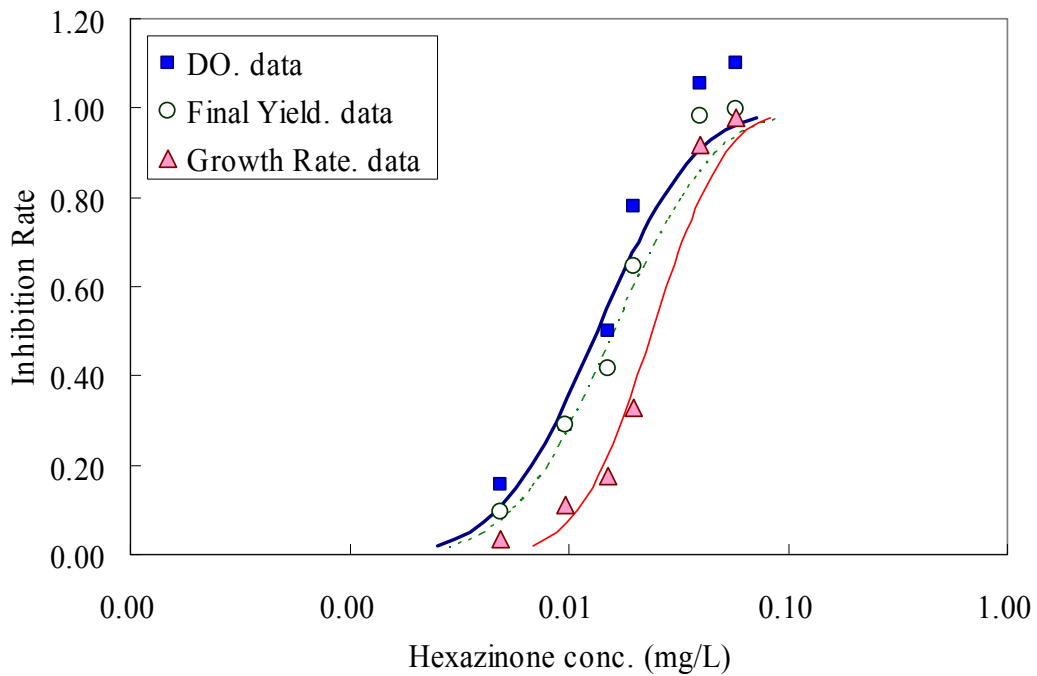


Fig 5.1.2 The Dose-response Curve of Hexazinone

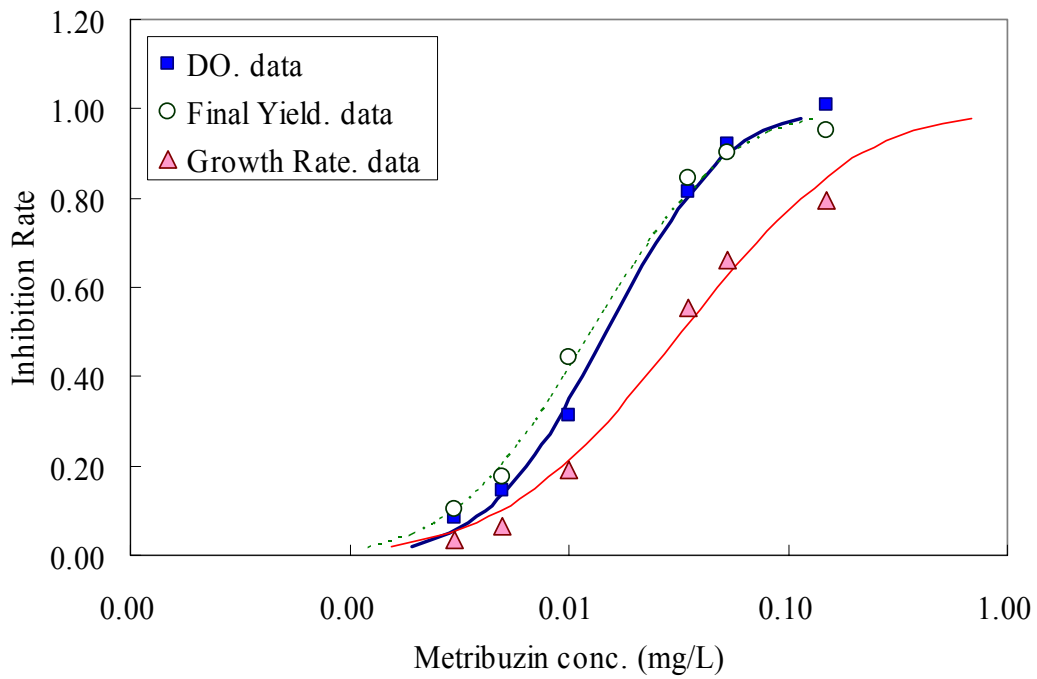


Fig 5.1.3 The Dose-response Curve of Metribuzin

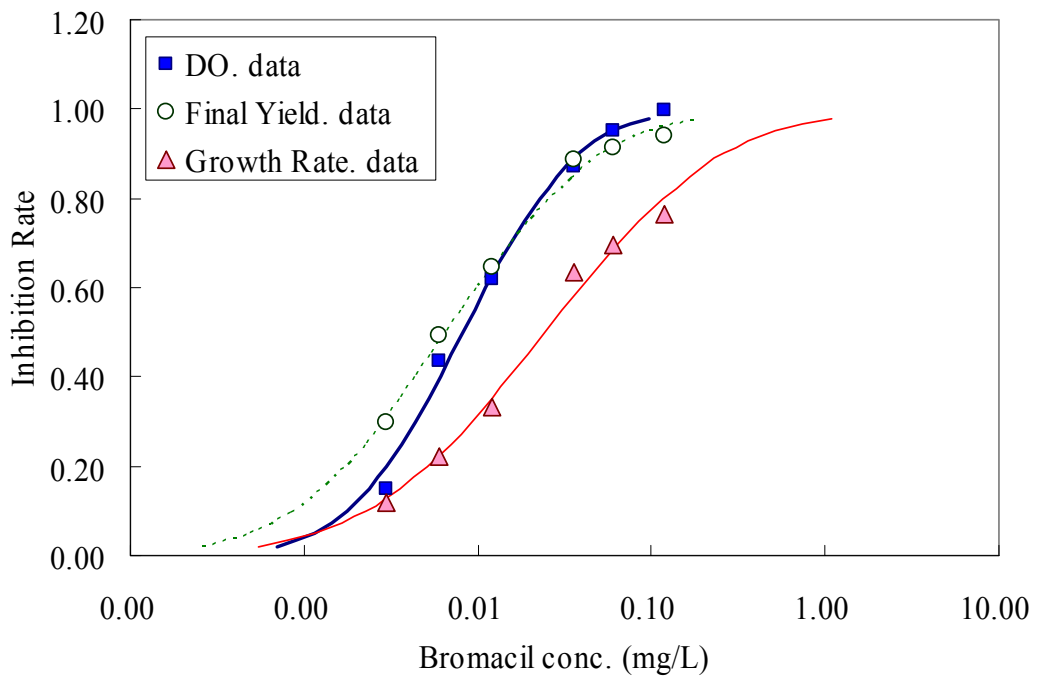


Fig 5.1.4 The Dose-response Curve of Bromacil

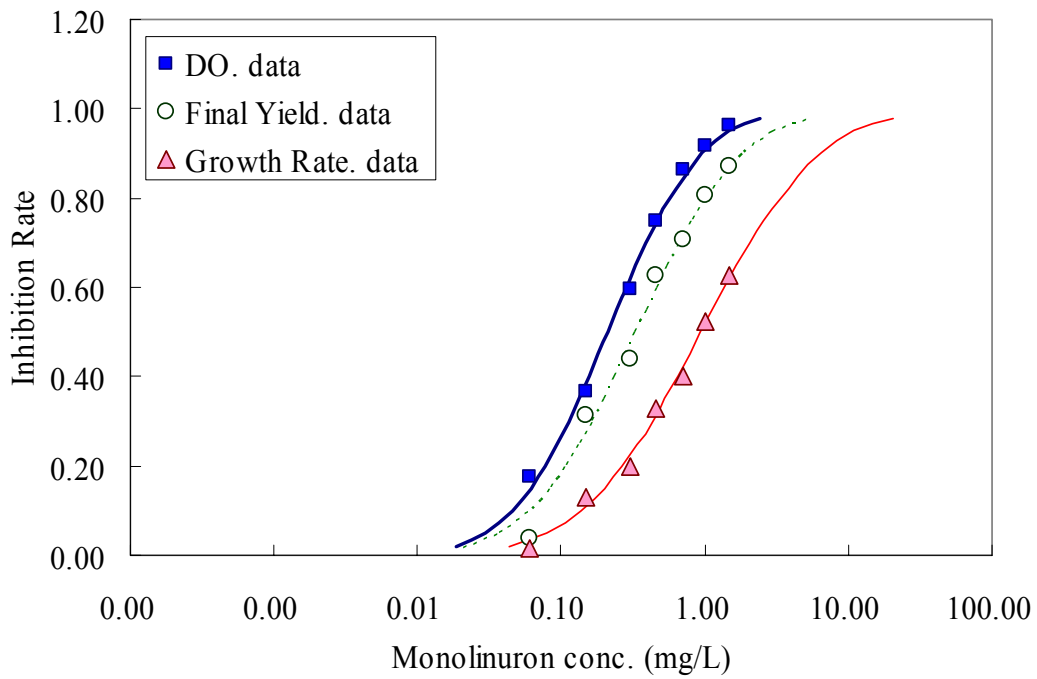


Fig 5.1.5 The Dose-response Curve of Monolinuron

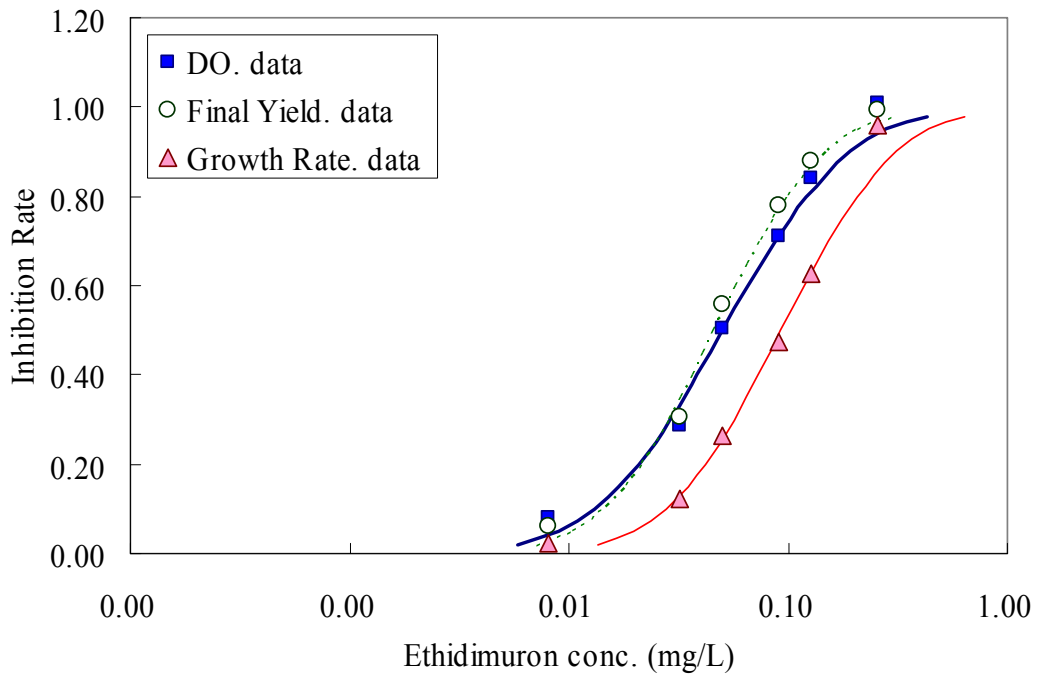


Fig 5.1.6 The Dose-response Curve of Ethidimuron

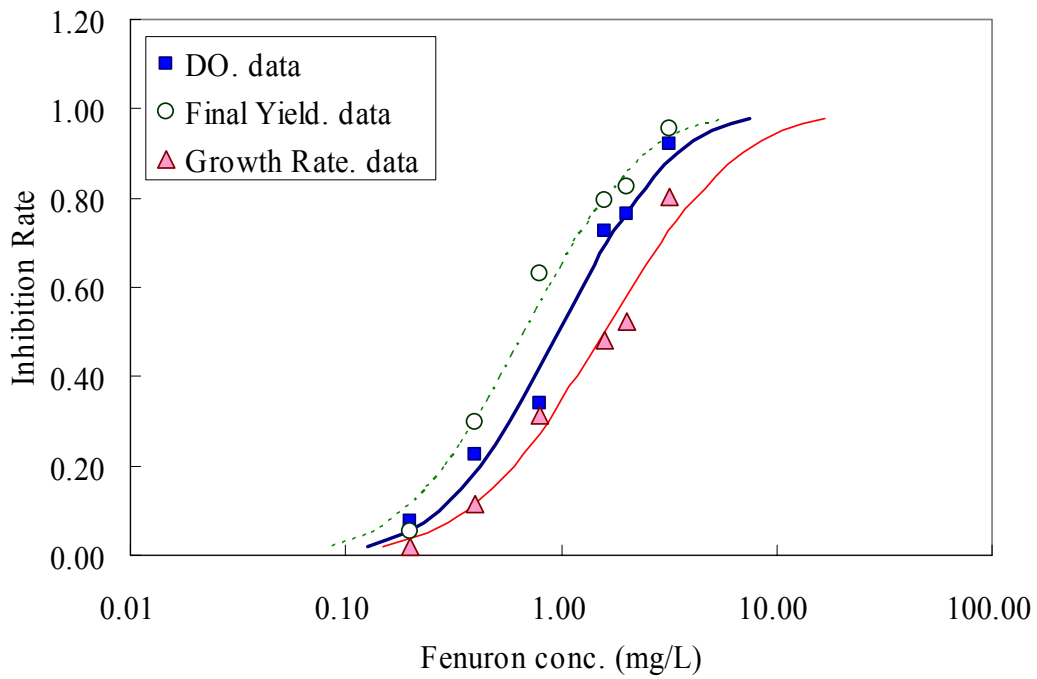


Fig 5.1.7 The Dose-response Curve of Fenuron

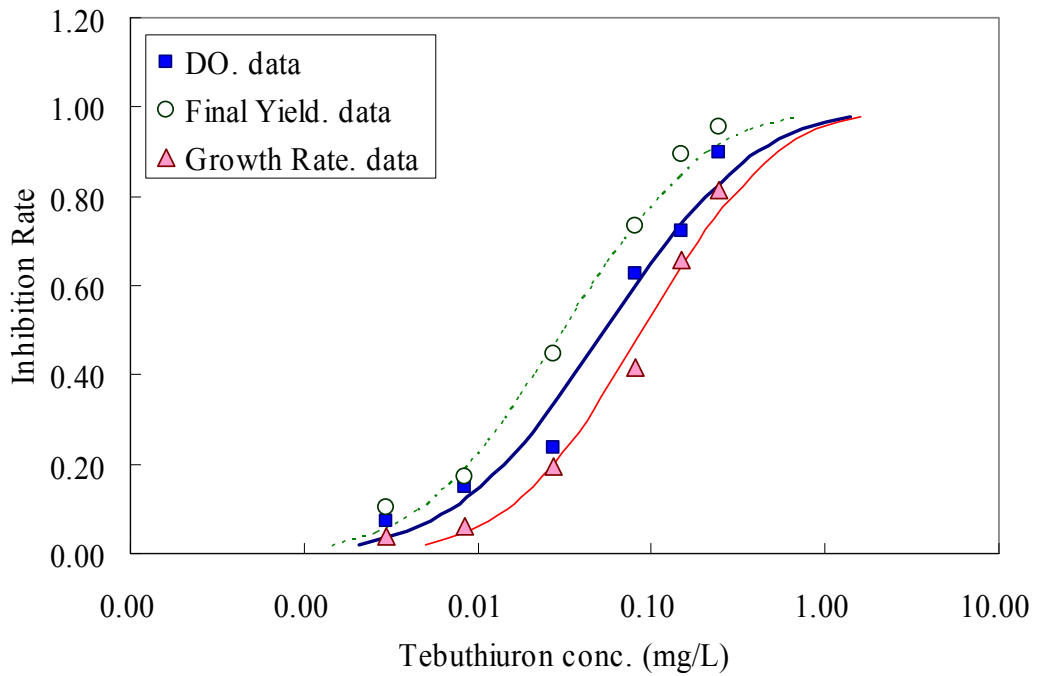


Fig 5.1.8 The Dose-response Curve of Tebuthiuron

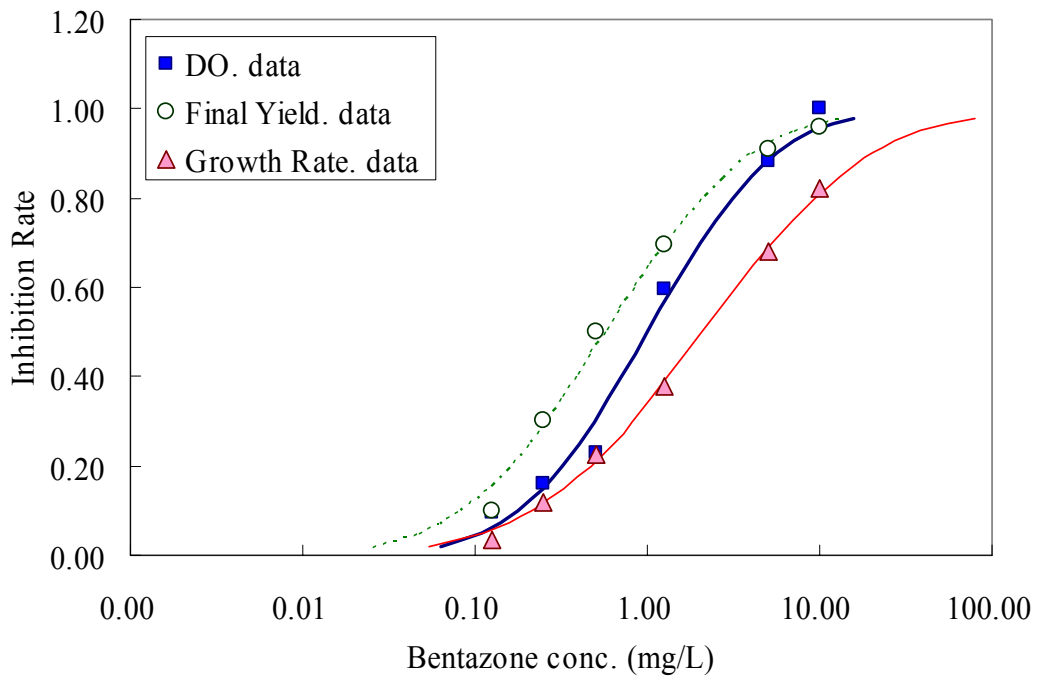


Fig 5.1.9 The Dose-response Curve of Bentazone

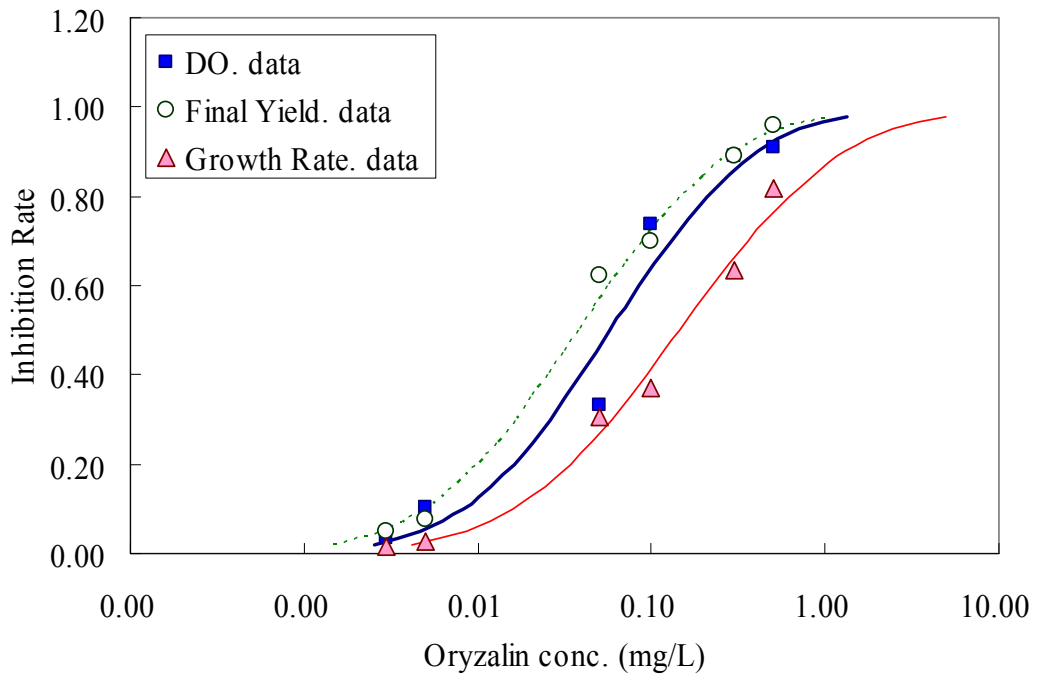


Fig 5.1.10 The Dose-response Curve of Oryzalin

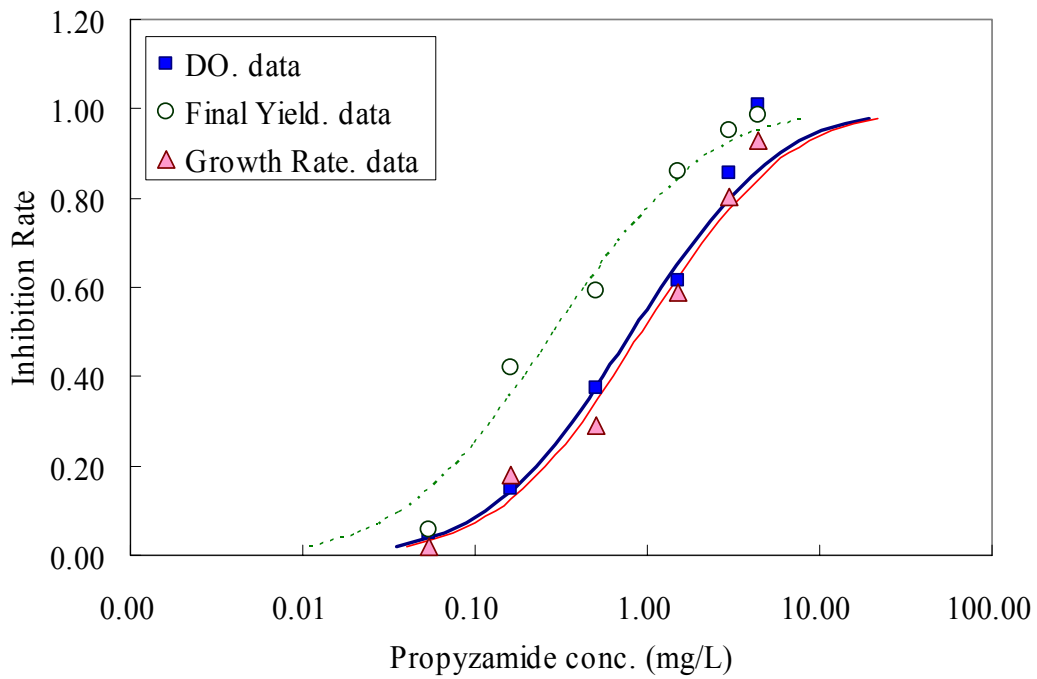


Fig 5.1.11 The Dose-response Curve of Propyzamide

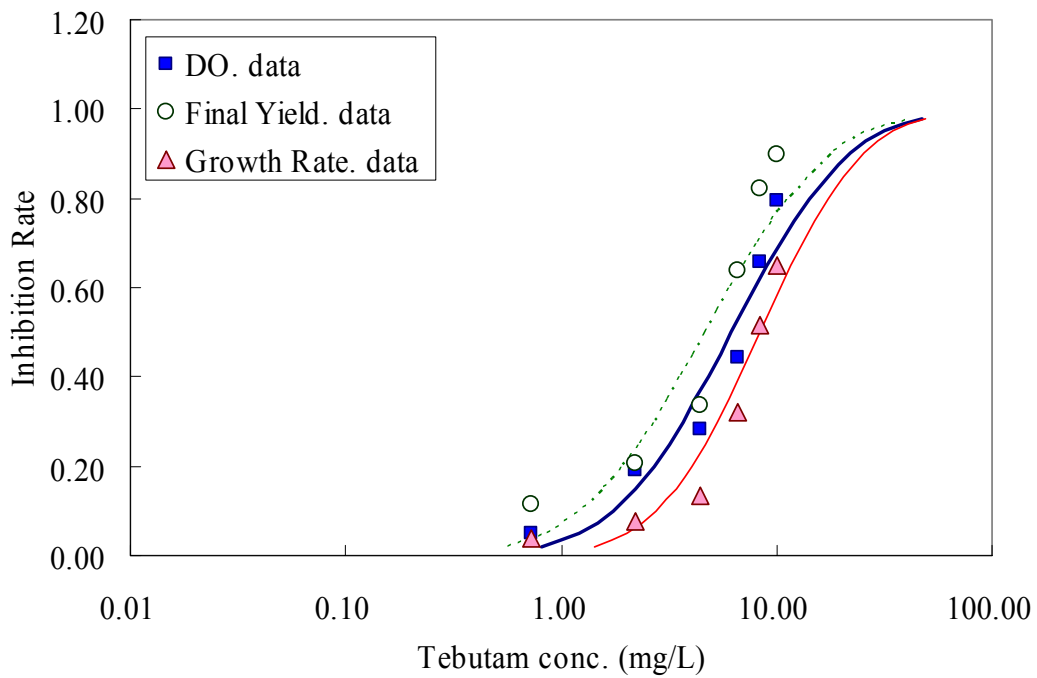


Fig 5.1.12 The Dose-response Curve of Tebutam

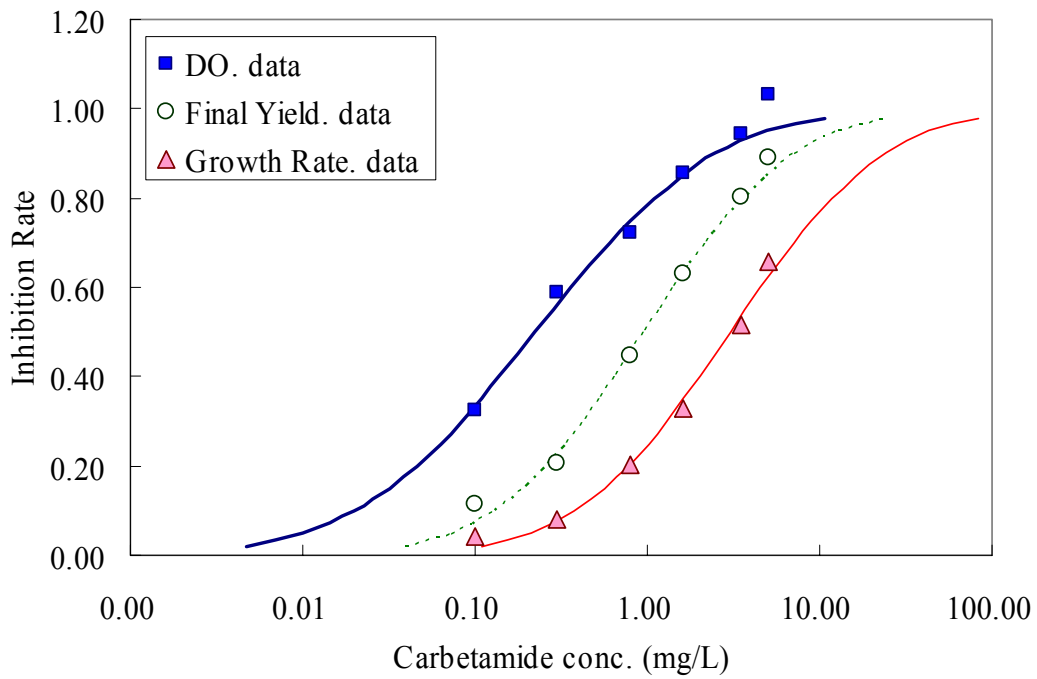


Fig 5.1.13 The Dose-response Curve of Carbetamide

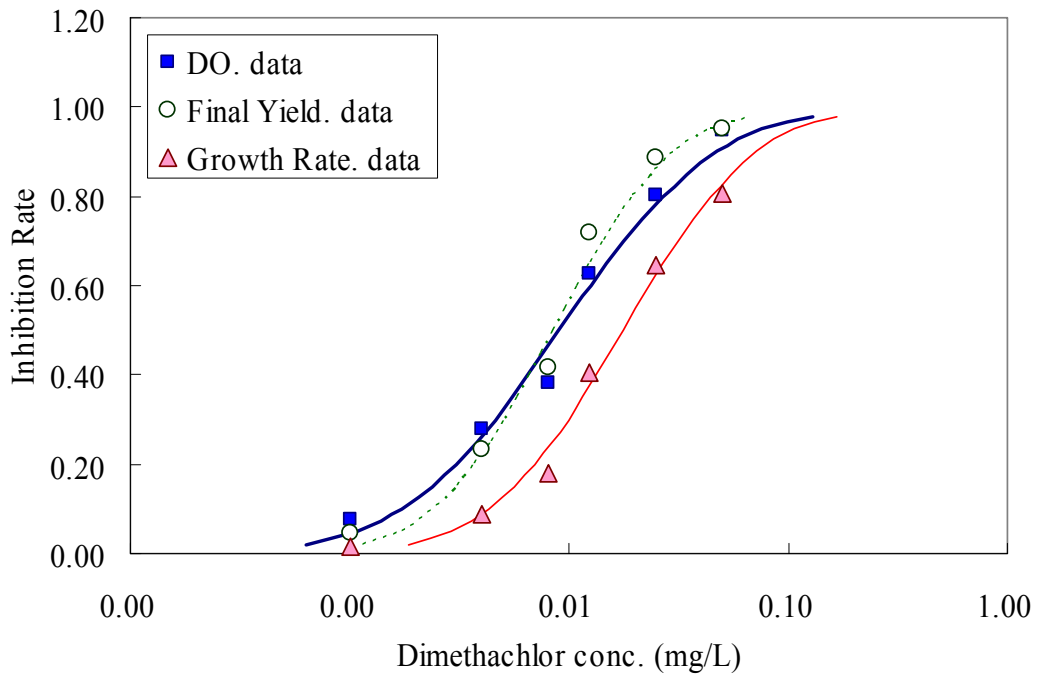


Fig 5.1.14 The Dose-response Curve of Dimethachlor

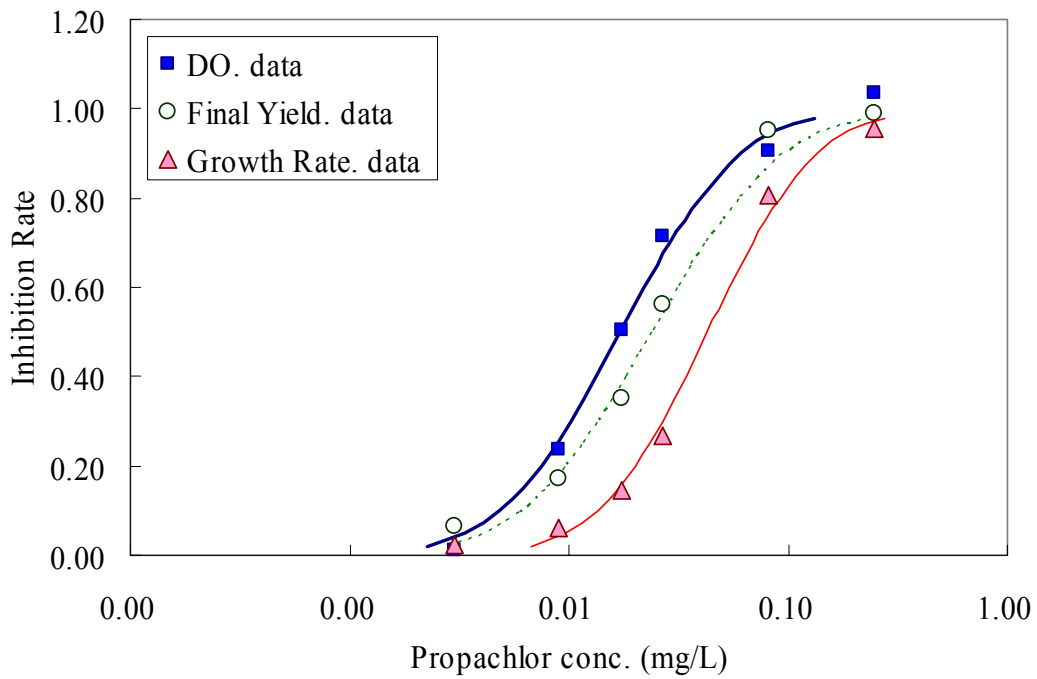


Fig 5.1.15 The Dose-response Curve of Propachlor

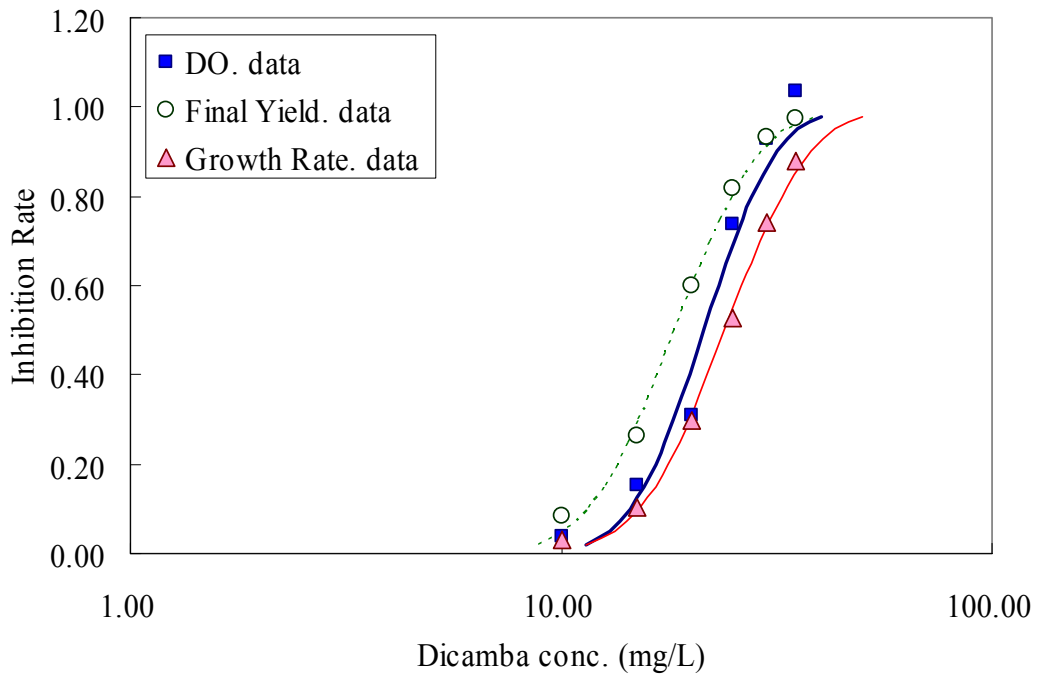


Fig 5.1.16 The Dose-response Curve of Dicamba

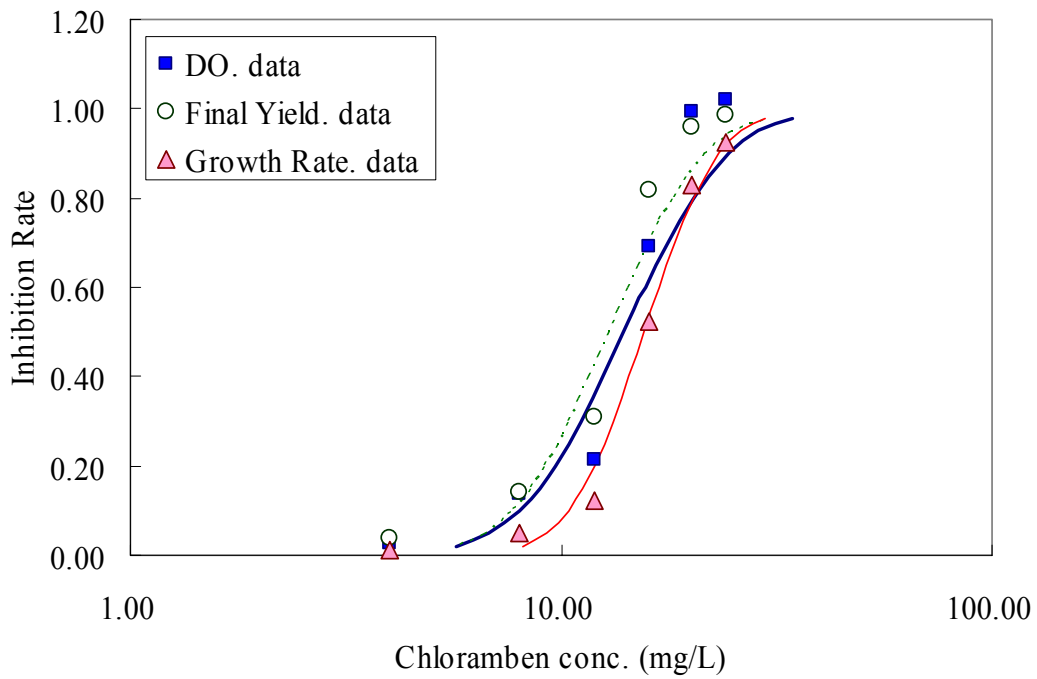


Fig 5.1.17 The Dose-response Curve of Chloramben

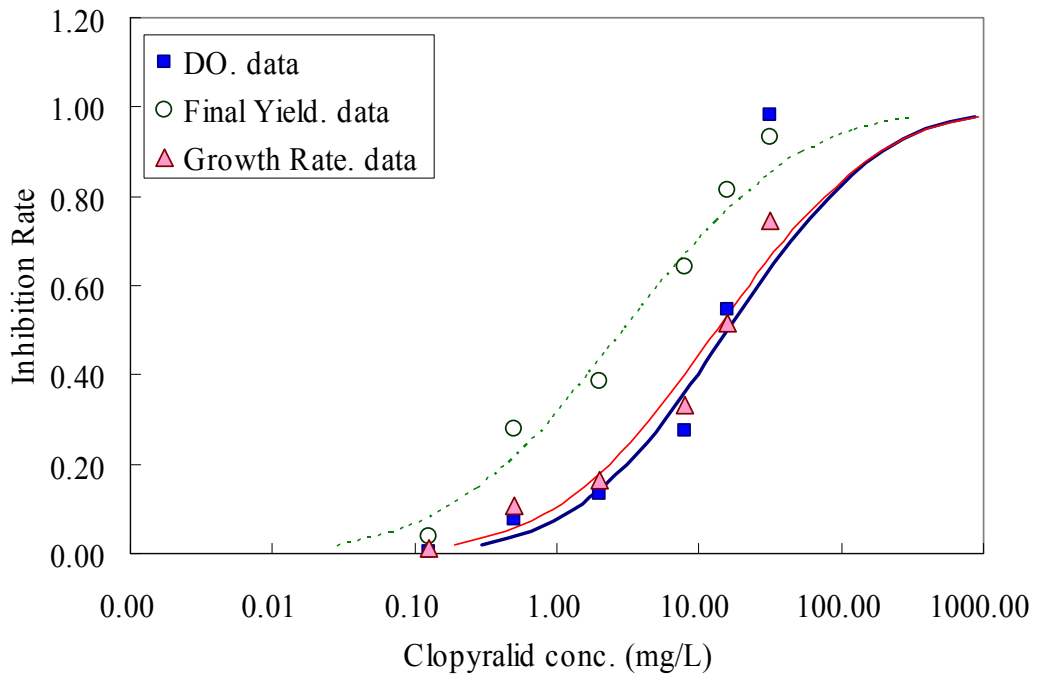


Fig 5.1.18 The Dose-response Curve of Clopyralid

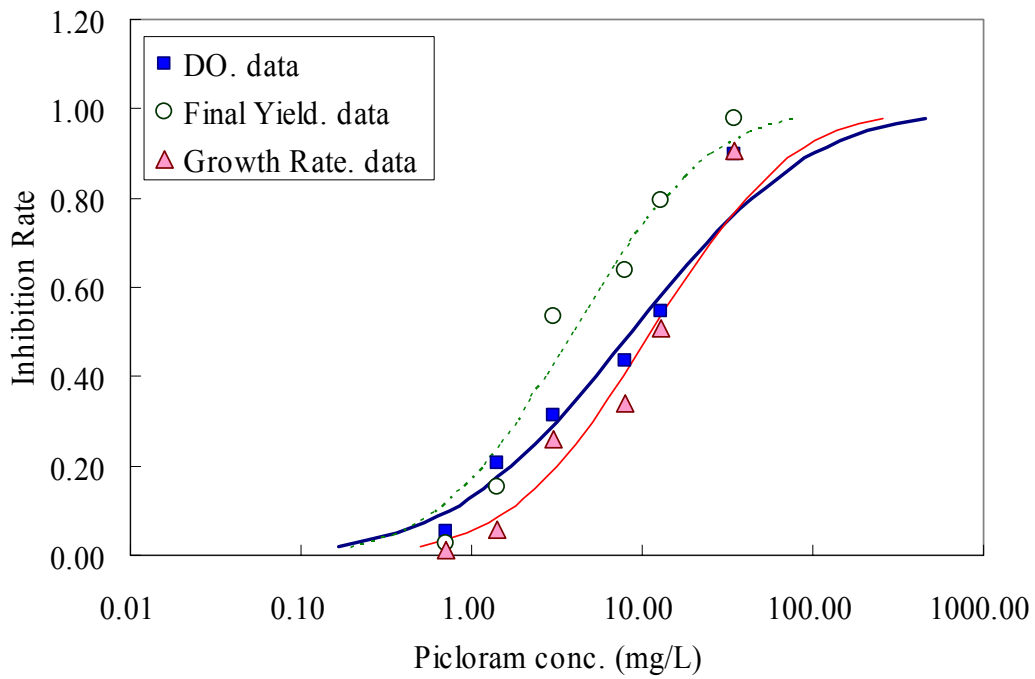


Fig 5.1.19 The Dose-response Curve of Picloram

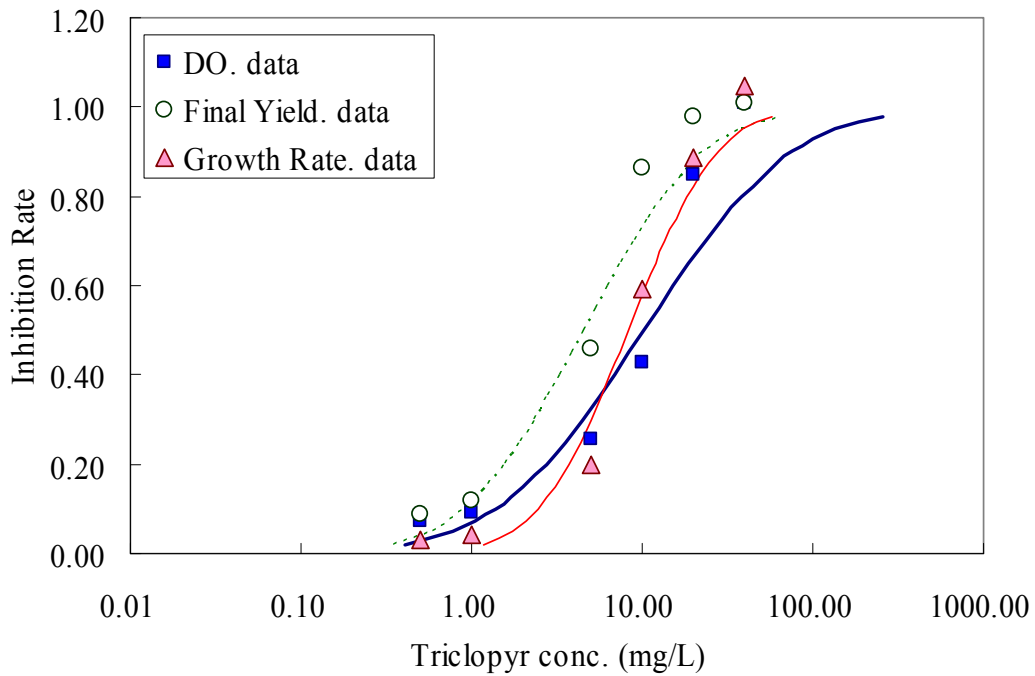


Fig 5.1.20 The Dose-response Curve of Triclopyr

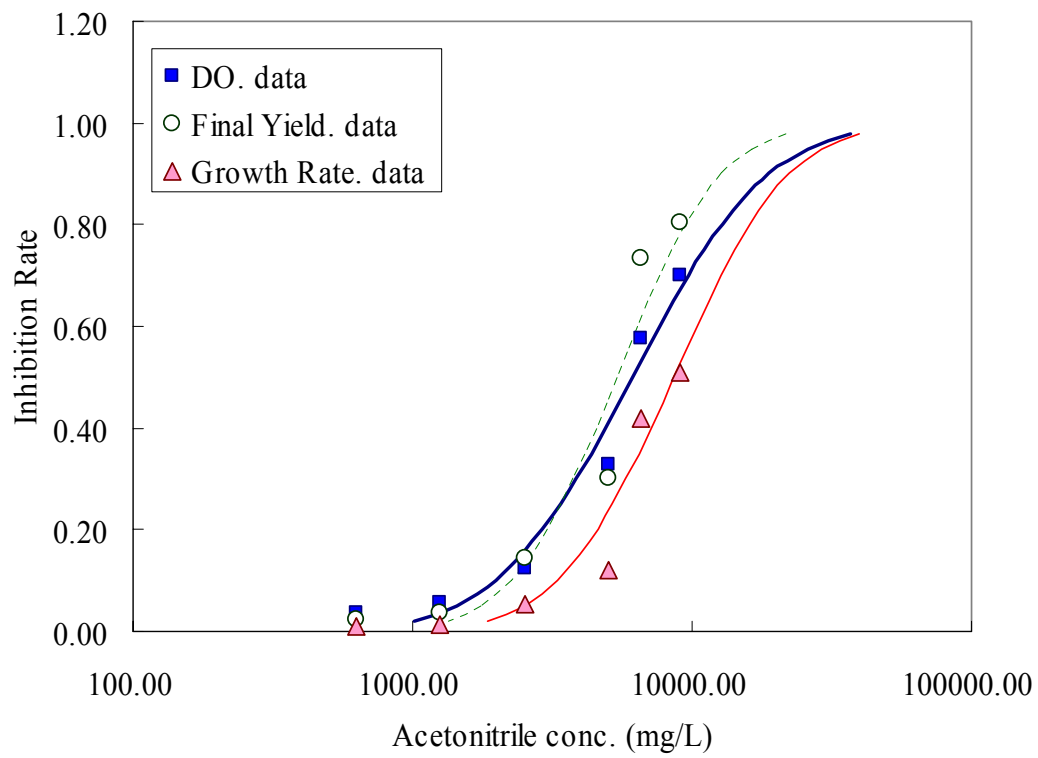


Fig 5.1.21 The Dose-response Curve of Acetonitrile



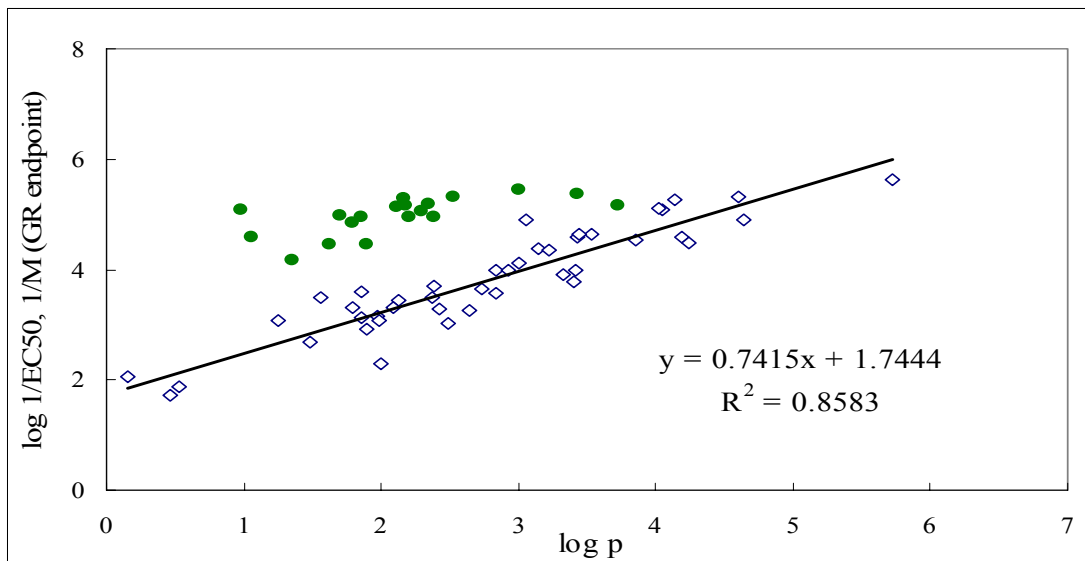
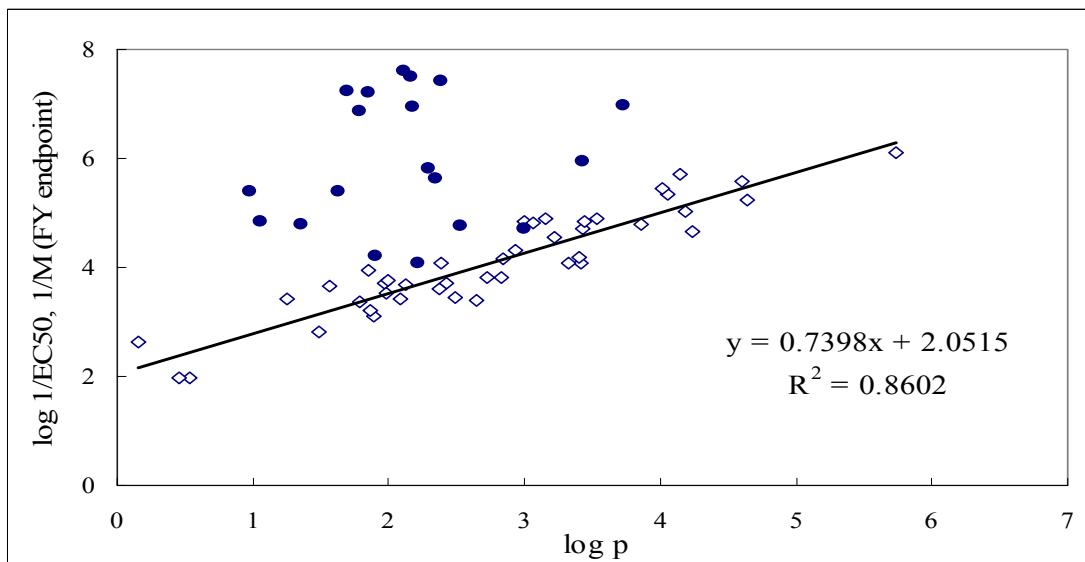
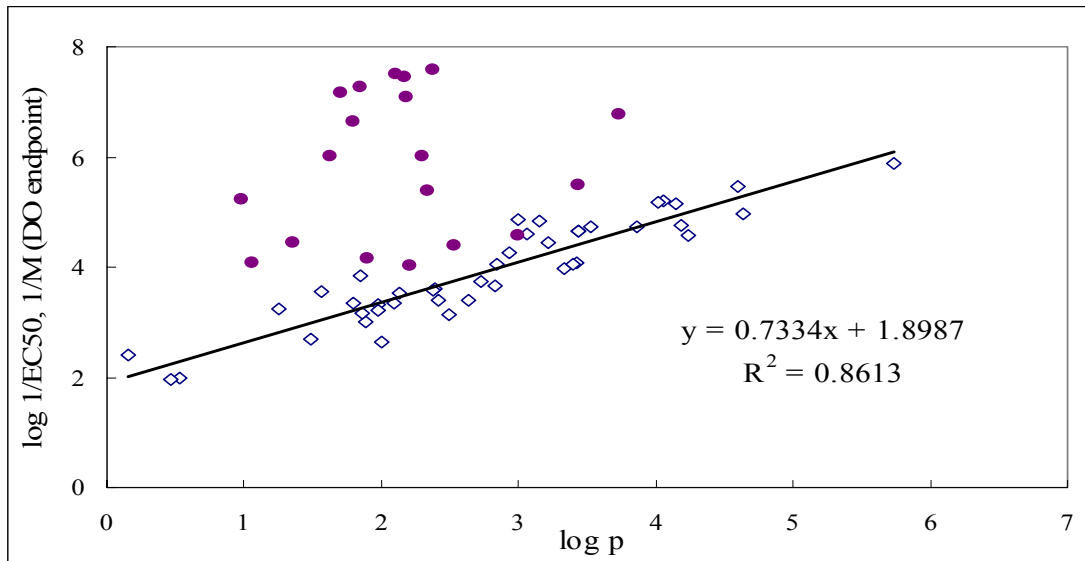


Fig 5.1.22 Comparing toxicity between herbicides and baseline toxicity

5.2 最佳化模式

為了了解實驗系統在不同受測物種下對不同毒性物質的敏感度，一般來說，皆是經由利用不同的數學模式來轉換實驗數據為 EC 值或 LC 值，用以方便比較或判定不同條件下的敏感度高低。

由於分析模式理論的不同，同一組數據經由不同模式所計算出的結果也會不一樣。在毒理學中常見的數學模式有 Probit、Weibull 與 Logit 三種，經由這三種回歸模式所計算出的 EC₅₀ 值較為穩定，分析差距皆不大，較具有代表性。

但是當應用濃度關係模式在計算低濃度時（例：EC₁₀），模式之間的差異性及信賴區間變大都會造成相當的分析誤差。為了避免上述情況的產生，因此以下試驗即針對實驗所求得的结果，經由三種常用的模式所求得的 EC₅₀ 值進行 G test 最佳化選擇（Goodness of fit）分析，以此選擇出最適合的計算模式來計算低濃度毒物的 EC₁₀ 值，經由對重覆試驗的每一處理組與期望值的誤差比較，所得絕對值最小的 G 值，即為適合的最佳模式。Table 5.2.1-5.2.3 為 G test 分析的結果。

經由計算後所呈現出的結果可看出在藻類 BOD 瓶的毒性試驗中，以三種不同的參數（ Δ DO，Final Yield 與 Growth Rate）皆是以 Weibull 模式在大多數情況下可得到絕對值最小的 G 值，因此在本實驗下，Weibull 可視為最佳迴歸模式，其次是 Probit 模式。而 Hsu⁽¹²⁾ 及 Lee⁽⁷⁷⁾ 利用與本試驗系統相同的試驗方式，分別針對非極性麻醉毒物及極性麻醉機制毒物進行實驗，所得的數據分析結果也是以 Weibull 模式較佳，和本實驗結果相符。

相同的結果也出現在 Prakash *et al.* ^[78] 利用 Polytox 對一些非極性麻醉毒物的實驗結果中，毒性數據分析後也認為 Weibull 模式較適用。

以 Herbicides 和麻醉性毒物來說，兩類化合物對於受測物種皆是透過特殊的作用機制來干擾物種的正常生長，和生物體的接受作用位置有關，因此以 Weibull 模式來計算較為合適，所以成為最佳化模式的比例也較高。Christensen and Chen ^[79] 曾建議 Weibull 模式是以機制-反應機率 (mechanistic-probabilistic) 來做為基礎，表示 Weibull 模式的參數可能和化學毒性上作用處的特殊性有關。

由於上一節的 EC_{50} 值是由 Probit 模式算出來的，但本節指出最佳化模式是以 Weibull 模式的比例較高，因此，在 Fig 5.2.1 中分別在不同反應參數下進行兩種模式的比較。發現到兩個模式的差異性並不會太大，而且 G test 是經由處理組與期望值的誤差所比較出來的，雖然在統計上來說，Weibull 模式較好，但通用性與普遍性仍以 Probit 模式較佳，且兩者的 EC_{50} 值差異並不大，因此以 Probit 模式來計算 EC_{50} 值仍是可行的。

Table 5.2.1 G values of dissolved oxygen production in three models

Group	Toxicants	G of Probit	G of Logit	G of Weibull	Best fit
C1	desmetryne	22.578	31.985	-5.373*	
	hexazinone	226.379	244.099	130.411*	
	metribuzin	36.239	41.736	2.018*	
	bromacil	-1.955*	7.301	-28.557	
C2	monolinuron	31.886	37.762	14.209*	
	ethidimuron	68.657	68.398	11.517*	
	fenuron	42.872	44.112	4.580*	
	tebuthiuron	52.914	50.774	10.533*	
C3	bentazon	44.159	48.728	-11.665*	
K1	oryzalin	54.851	52.830	-19.764*	Weibull (90 %)
	propyzamide	125.582	-161.319	59.586*	
	tebutam	68.742	63.834	26.627*	
K2	carbetamide	57.943*	72.902	434.859	
K3	dimethachlor	48.176	49.324	-2.137*	
	propachlor	11.592	13.899	-10.223*	
O	dicamba	136.428	130.739	41.025*	
	chloramben	271.089	235.472	93.804*	
	clopyralid	274.695	255.052	175.664*	
	picloram	60.784	67.594	17.229*	
	triclopyr	246.288	241.305	94.719*	

* : The lowest absolute G value in three models is the optimum values

Table 5.2.2 G values of Final Yield in three models

Group	Toxicants	G of Probit	G of Logit	G of Weibull	Best fit
C1	desmetryne	-8.419*	-11.122	-37.315	
	hexazinone	128.721	138.298	30.832*	
	metribuzin	-9.264*	-14.215	-31.846	
	bromacil	-0.070*	3.121	-6.312	
C2	monolinuron	12.289	5.652	-3.239*	
	ethidimuron	35.535	34.386	-14.014*	
	fenuron	-7.506	-7.150*	-35.040	
	tebuthiuron	52.924	59.238	2.228*	
C3	bentazon	-20.932	-19.134*	-45.959	
K1	oryzalin	-7.988	-6.173*	-61.259	Weibull (55 %)
	propyzamide	13.880*	32.484	-24.641	
	tebutam	128.797	133.255	47.909*	
K2	carbetamide	24.951	25.640	-5.372*	
K3	dimethachlor	36.381	33.098	-15.620*	
	propachlor	73.244	74.582	6.350*	
O	dicamba	55.688	59.937	5.082*	
	chloramben	180.757	165.674*	-198.772	
	clopyralid	47.101	55.251	8.583*	
	picloram	4.229*	6.164	-42.804	
	triclopyr	161.040	182.084	44.914*	

* : The lowest absolute G value in three models is the optimum values

Table 5.2.3 G values of Growth rate in three models

Group	Toxicants	G of Probit	G of Logit	G of Weibull	Best fit
C1	desmetryne	-0.879*	-8.892	-21.655	
	hexazinone	136.667	125.208	31.533*	
	metribuzin	-22.307*	-32.568	-65.558	
	bromacil	0.701*	-2.164	-16.687	
C2	monolinuron	26.174	21.826	19.486*	
	ethidimuron	74.393	68.744	11.729*	
	fenuron	25.100	23.332	-1.438*	
	tebuthiuron	58.064	48.872	19.026*	
C3	bentazon	-0.592*	-5.221	-22.506	
K1	oryzalin	24.506	15.524	-8.204*	Weibull (75 %)
	propyzamide	52.979	41.108	10.519*	
	tebutam	49.931	37.420	22.207*	
K2	carbetamide	23.266	16.282	4.861*	
K3	dimethachlor	2.972*	-11.366	-38.820	
	propachlor	43.560	29.322	-13.543*	
O	dicamba	45.413	34.507	-2.500*	
	chloramben	82.516	47.909	-13.779*	
	clopyralid	42.662	38.753	18.632*	
	picloram	67.632	71.734	12.281*	
	triclopyr	145.955	121.157	42.642*	

* : The lowest absolute G value in three models is the optimum values

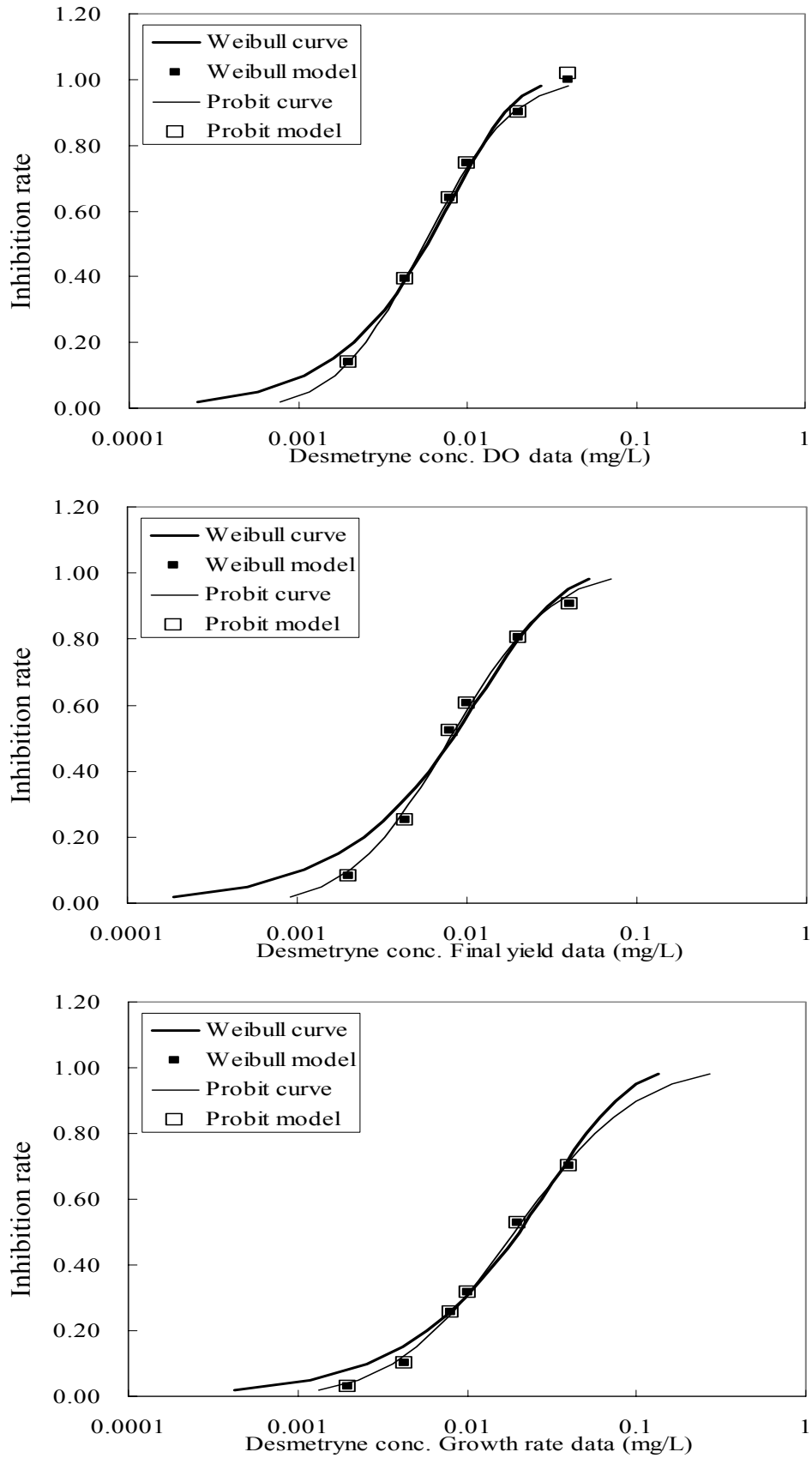


Fig 5.2.1 The Dose-response Curve between Weibull and Probit model

5.3 EC₁₀ 值和 NOEC 值的比較

在本篇研究中分別以三種不同的試驗參數（溶氧產生量、細胞密度變化量及生長率）來討論 BOD 瓶藻類毒性試驗之 EC₁₀ 值和 NOEC 值（No Observed Effect Concentration）。

NOEC 值的判定通常和實驗濃度的取決、重複組的數量和選定參數有所關聯。一般 NOEC 值是由統計方法中的 Dunnett's test 方法來做分析的，若重複組間的差異變小，與處理組的差距便較為明顯，所求得的 NOEC 值也較為準確，通常較不嚴謹的實驗易出現較高的 NOEC 值。

Table 5.3.1 列出了由 Dunnett's test 所得到的 NOEC 值，而 EC₁₀ 則是根據前節所決定的最佳化模式所計算出的，並列出了三種不同參數的 EC₁₀ 與 NOEC 值比例。在 NOEC 值的比較方面，三種不同參數有著相同 NOEC 值的毒性物質僅有三種，其它數據不是無法比較就是溶氧產生量和細胞密度的變化量較生長率要來得敏感，而溶氧產生量和細胞密度變化量兩種參數的敏感度是差不多的，在生長率方面僅有三種毒性物質的 NOEC 值小於實驗濃度的最小值，而溶氧產生量和細胞密度變化皆都有 70% 的 NOEC 值較實驗時的最低濃度還要來得低。接著在與 EC₁₀ 的比較之下，以溶氧產生量為參數時的 EC₁₀/NOEC 的比值在 0.2 至 12.14 之間，其中 >1 的組數有 13 組，佔了 65%；當以細胞密度變化量來討論時可以發現到，也是有 11 組的物質 EC₁₀/NOEC 比值 >1，約由 0.5 到 1.965 之間，佔了 55%；但是，若以生長率來看的話，卻有 17 組數據的比值 >1，佔了 85%，值約在 0.72-4.33 之間。以溶氧產生量來看，最小的比值，也就是 desmetryne 和最大值 clopyralid 差了近 22 倍，比其他 2 個參數要多許多。三種不同參數皆表現

出 NOEC 值較 EC_{10} 來得敏感能在毒性評估中提供較好的保護。

然而由上述的分析方法無法描述 NOEC 值與 EC_{10} 何者較為嚴謹，為了更深入比較 EC_{10} 與 NOEC，本實驗將更進一步地利用 ANOVA (analysis of variance) 檢定三項重要參數：Sw、F ration 以及中斷值 (cut-off value)。Sw 代表的是試驗的組內變異，而 F ration 為組間變異與組內變異的比值，用以表示組間與組內變異的差異程度。

由 Table 5.3.2 發現到 Sw 值在三種參數下的差異性皆很大，主要是溶氧產生量的單位是 mg/L，細胞密度變化量的單位是 cells/mL，使得 Sw 不能用以直接比較三種反應終點的組內變異，也因此 F ration 基於相同理由，同樣無法判斷哪一個觀測參數較為精準。為了能夠比較不同參數的準確度，本研究使用了一判斷參數中斷值，此中斷值與 Sw 成比例關係，且介於 NOEC 與 LOEC 之間，能夠更嚴謹地判斷藻類受到抑制的顯著性，並使之包含單位的複雜參數與控制組的平均值比較並以抑制的百分率作為單位，使其能夠用於不同單位的試驗終點間的比較。

由 Table 5.3.2 以溶氧產生量、細胞密度變化量及生長率為反應終點的平均中斷值分別是 5.45、6.16 及 5.62，而全部試驗中以溶氧和生長率為反應終點所得到的中斷值較細胞密度小的分別各佔了全部的 40%，顯示以這兩項參數作為反應終點比細胞密度的變化量要好許多。

因為中斷值介於 NOEC 與 LOEC 之間，但高於 NOEC，故當中斷值小於 10% 時，生物受到 NOEC 的影響濃度會比 10% 的抑制濃度要低，也就是說，此時建議選擇 NOEC 值會比 EC_{10} 提供更加嚴謹的保護標準。Table 5.3.2 中，三種不同反應終點的中斷值，除了 monolinuron 的中斷值是唯一大於 10% 之外 (溶氧為 15.49%，細胞密度為 19.09% 及生長率為 13.45%)，

其他毒性物質的中斷值皆小於 10%，由此可知，以對於本研究的毒性物質而言，NOEC 值比 EC_{10} 能提供更佳的保護標準。而整個分析中，可能會導致高變異性的原因可能來自於所使用的藻類未達穩定狀態、或試驗過程不夠嚴謹以及毒性物質濃度設定不理想，都會產生分析上的偏差。

而一個較小的 cut-off value 顯示此試驗組內變異相對地較小，因而有一定的精準度。綜合上述的討論可知，NOEC 比起 EC_{10} 更能提供對生物較好的保護，而比較三種反應終點，可以發現到，溶氧產生量和生長率為試終點時皆具有較小的組內變異。



Table 5.3.1 The relationship of NOEC and EC₁₀

Group	Toxicants	NOEC(mg/L)			EC ₁₀ (mg/L)			EC ₁₀ /NOEC		
		DO	Final Yield	Growth Rate	DO	Final Yield	Growth Rate	DO	Final Yield	Growth Rate
C1	desmetryne	<0.002	<0.002	0.002	0.0011 ^w	0.0021 ^p	0.0036 ^p	>0.5470	>1.0251	1.8102
	hexazinone	<0.00486	<0.00486	0.00486	0.0045 ^w	0.0050 ^w	0.0107 ^w	>0.9311	>1.0373	2.2093
	metribuzin	<0.003	<0.003	0.003	0.0035 ^w	0.0029 ^p	0.0049 ^p	>1.1539	>0.9678	1.6226
	bromacil	<0.003	<0.003	<0.003	0.0018 ^p	0.0008 ^p	0.0023 ^p	>0.5880	>0.2773	>0.7592
C2	monolinuron	<0.06	0.06	0.15	0.0294 ^w	0.0306 ^w	0.1084 ^w	>0.4907	0.5101	0.7224
	ethidimuron	<0.008	<0.008	0.008	0.0104 ^w	0.0104 ^w	0.0247 ^w	>1.3036	>1.3055	3.0906
	fenuron	<0.2	0.2	0.2	0.2208 ^w	0.1680 ^L	0.2948 ^w	>1.1039	0.8401	1.4741
	tebutiuron	<0.003	<0.003	0.0085	0.0060 ^w	0.0033 ^w	0.0136 ^w	>1.9870	>1.1010	1.6052
C3	bentazon	<0.125	<0.125	<0.125	0.1273 ^w	0.0754 ^L	0.2142 ^p	>1.0182	>0.6029	>1.7134
K1	oryzalin	<0.003	<0.003	0.005	0.0051 ^w	0.0047 ^L	0.0104 ^w	>1.6864	>1.5752	2.0730
	propyzamide	0.054	<0.054	0.054	0.0885 ^w	0.0357 ^p	0.1016 ^w	1.6386	>0.6619	1.8809
	tebutam	<0.73	<0.73	<0.73	1.7256 ^w	1.2179 ^w	3.0214 ^w	>2.3638	>1.6684	>4.1389
K2	carbetamide	<0.1	<0.1	0.1	0.0200 ^p	0.0852 ^w	0.3418 ^w	>0.2001	>0.8524	3.4179
K3	dimethachlor	<0.001	<0.001	0.001	0.0013 ^w	0.0016 ^w	0.0043 ^p	>1.2573	>1.5899	4.3349
	propachlor	0.003	<0.003	0.003	0.0025 ^w	0.0051 ^w	0.0108 ^w	0.8374	>1.7155	3.5903
O	dicamba	10.064	10.064	10.064	14.238 ^w	10.200 ^w	13.959 ^w	1.4147	1.0135	1.3870
	chloramben	4	4	4	8.1320 ^w	7.8598 ^L	9.7799 ^w	2.0330	1.9650	2.4450
	clopyralid	0.125	0.125	0.125	1.5178 ^w	0.0835 ^w	0.9137 ^w	12.1424	0.6679	7.3097
	picloram	0.703	0.703	1.4015	0.5626 ^w	0.5996 ^p	1.3232 ^w	0.8002	0.8529	0.9441
	triclopyr	<0.501	<0.501	0.501	1.6017 ^w	0.9330 ^w	2.4645 ^w	>3.1970	>1.8623	4.9192

NOEC is conducted by Dunnett's test, EC₁₀ is conducted by three models; P for Probit, L for Logit and W for Weibull

Table 5.3.2 The important statistical parameters in three test end-points

Group	Toxicants	DO			Final Yield			Growth Rate		
		Sw	F- rati on	cut-off value(%)	Sw	F- rati on	cut-off value(%)	Sw	F- rati on	cut-off value(%)
C1	desmetryne	0.12	851.52	4.08	6803.14	221.76	7.17	0.05	143.99	7.77
	hexazinone	0.20	595.86	5.90	10366.8	223.53	8.50	0.04	669.74	5.88
	metribuzin	0.17	954.59	4.88	6728.17	561.47	5.50	0.03	572.23	5.01
	bromacil	0.18	487.81	5.52	7292.39	221.18	6.05	0.04	348.99	5.31
C2	monolinuron	0.47	47.51	15.49	19424.8	25.52	19.09	0.08	25.89	13.45
	ethidimuron	0.11	1891.05	2.94	2822.04	2599.26	2.41	0.03	944.68	4.15
	fenuron	0.25	345.82	6.67	6451.27	537.86	5.16	0.04	261.16	6.53
	tebuthiuron	0.25	366.00	6.52	7414.03	388.64	6.37	0.05	249.75	7.47
C3	bentazon	0.24	489.12	6.43	5038.30	766.05	4.22	0.02	1299.29	3.20
K1	oryzalin	0.07	5456.03	1.95	4918.73	1337.88	3.75	0.04	331.23	6.49
	propyzamide	0.23	561.18	5.93	4297.61	1125.93	3.69	0.02	1388.73	3.54
	tebutam	0.10	1587.98	2.60	5451.76	711.59	4.26	0.03	548.00	3.93
K2	carbetamide	0.20	193.88	6.78	5950.26	353.49	5.71	0.03	309.24	5.09
K3	dimethachlor	0.17	684.44	4.61	3226.37	1852.47	2.92	0.01	2690.57	2.24
	propachlor	0.18	935.23	4.69	6307.62	635.86	5.32	0.03	875.07	4.96
O	dicamba	0.17	1132.11	4.57	8988.39	254.81	7.87	0.03	603.76	5.12
	chloramben	0.19	1014.09	5.09	8131.49	458.29	6.86	0.03	909.63	4.91
	clopyralid	0.19	697.90	5.11	8941.60	218.35	7.86	0.03	389.80	5.13
	picloram	0.21	323.58	5.97	7543.10	278.39	7.48	0.05	193.60	8.65
	triclopyr	0.12	2011.60	3.21	3579.34	2369.42	2.98	0.02	1931.63	3.67
	mean	0.19	1031.36	5.45	6983.86	757.09	6.16	0.04	734.35	5.62

Sw : Variation between columns

F-rati on : The rati on of variation within columns to variation between columns

5.4 試驗物種數據收集與比較

由於除草劑這類毒性物質是在近幾十年來才漸漸受到關注，尤其是除草劑在藻類這種非作用目標物種的試驗不多，所以能比較的數據並不多。本實驗主要只針對月芽藻來進行實驗，但基於毒物對物種的影響力、成本或便利性不盡相同，幾十年來也發展出不同實驗裝置，無論是開放式或半密閉式、密閉式設備，其中更包括了許多各式各樣的實驗物種。雖然無法在這麼多的生物中判定其中哪個為最為敏感的物種，但是毒性數據與其他物種研究結果之間的比較仍略顯得必要；這樣的比較可以提供出較為明確且完整評估毒性物質的方法。

本研究將收集了許多標準方法與以往文獻裡利用不同物種所做的毒性試驗結果，數據表列於 Table 5.4.1 至 Table 5.4.3。這些表格主要分為水體動物 (Table 5.4.1)、魚或無脊椎動物 (Table 5.4.2) 及月芽藻 (Table 5.4.3) 等的毒性數據。Fig 5.4.1 是分別將以水體動物當作測試物種的毒性數據與本研究所利用三種不同反應參數所描繪出的敏感性比較圖，經由畫出 45 度的對角線來判別物種敏感性的差別。如果圖例是落於對角線的上半部，則表示是 X 軸的數據比 Y 軸來得小，即是利用本研究方法所得到的實驗結果敏感性較高。

在 *R. trout* 與 *D. magna* 的圖形 (Fig 5.4.2 至 Fig 5.4.4) 中，也是呈現出相同的結果，顯示這些除草劑對於植物具有較顯著的抑制作用，故敏感度相對於其他的水體動物也較高。

而 Fig 5.4.5 列出的實驗數據是屬於受測物種同樣是月芽藻的文獻值，在三種不同參數下所呈現的結果。大部份的實驗敏感度都是本研究利用密閉式實驗條件下得到的結果較高。並且將三種參數分別作比較之後，以 Final Yield 為反應參數的敏感性更優於 Δ DO 及 Growth rate，而 Growth rate 的敏感性和其他不同實驗情況下所得到的結果比較之後是最差的。

Table 5.4.3 也列出了上述試驗數據的個別實驗條件，文獻資料的試驗時間皆長達 96 小時，比起本研究足足多了一倍的時間。此外，實驗所需的初始細胞密度也比本研究要來的多，在 Moreno-Garrido *et al.* ^[80] 的研究中也證實了 72 小時的藻類毒性試驗之下，初始細胞密度和 EC₅₀ 值的敏感度會呈現反比的情況。經由進一步的比較之後，本研究的參數敏感度，以 Final Yield 來說，比文獻值要高出 1 倍左右，表示利用本研究的實驗方法只要以往二分之一的試驗時間以及較少量測試物種就可以得到良好的實驗結果再現性與敏感度。

由此，本研究推論出，主要可能是因為實驗裝置上的差異所造成，本研究改良的密閉式系統，即是為了避免這類具有揮發性的毒性物質可能於實驗過程中產生逸散的缺點所發展出來，並且也顯示出本研究在較短的時間內（48 小時）仍然可以得到具有較高敏感性的實驗結果。

依目前收集到的資料更能對應到毒性結果與裝置有一定的相關性表現。故為了印證本研究結果與過去的數據之間有這樣的明顯差異，實驗再針對揮發性與 EC₅₀ 做線性迴歸，來了解之間的關聯度。Table 5.4.5、Fig 5.4.6 為迴歸出的結果；Y 軸是過去的數據與本實驗作出之數據的比值，X 軸則為蒸汽壓的對數值。發現到最後迴歸出 R² 雖然只達到 0.67，但是仍可表示兩者間具有一定的相關性；在幾個揮發性較高的除草劑數據比值上，也可以看到，揮發性越高，EC₅₀-ratio 的值也愈高（例如：metribuzin 與 bentazon）；這也可初步推論出過去的研究是因為實驗的裝置問題，造成實驗期間毒物的揮發，這樣的實驗數據可能有低估毒性程度的情形產生。但此部份因為收集到數據較少，說服力也略顯不足，所以這方面的研究則需要在未來的實驗中再多作一些確認的工作。

針對無脊椎動物及魚類數據所呈現的結果可發現到（Table 5.4.2），除草劑對這些物種的影響以 K 類，抑制細胞分裂型最為顯著；其次是類生長素型，而抑制光合作用型的除草劑對這些物種的影響就不明顯了，差別可達到 1000 倍以上，這樣的結果也符合了三種除草劑於不同作用機制下所

呈現的差異性。和細胞分裂有關的除草劑不論在動物或植物上皆產生了相當的抑制效果，但是對植物的毒性仍是較強的。而在抑制光合作用型的除草劑上即可明顯的比較出，這類型的除草劑主要是針對植物光合作用的干擾，因此對於動物類的毒性試驗敏感度較差，比起本實驗所使用的綠藻類更是低了有 10^5 倍之多。

以上的數據雖都証明了以除草劑來說本實驗無論是在實驗條件及物種的選擇上皆具有一定程度的敏感性，但存在於其中少許的差異反應則需要再進一步的探討，這可能要再深入了解到毒物進入生物體中所造成的代謝反應或轉化過程有關。

另外，由農藥毒性分類的表中 (Table 2.3.1)，發現以往的分類是以水體動物或無脊椎動物的毒性試驗結果來討論的，但經由實驗結果的比較，除草劑對於植物物種的敏感性明顯比動物要來的高，且若是依據動物的分類來的話，本篇研究的除草劑多是屬於「分類 I—劇毒」，已這樣來定義毒性程度似乎不甚恰當，利用藻類或是浮萍等物種來對農藥相關的毒性物質進行毒性試驗的研究也愈來愈多了，或許相關單位可以進一步的對農藥在非目標生物毒性試驗上的毒性程度分類做重新區分。

Table 5.4.1 Comparisons of algal toxicity test results with other species ⁽⁸¹⁾

Group	Toxicants	<i>P. subcapitata</i> BOD test, 48h-EC ₅₀			Guppy	S. minnow	F. minnow	Goldfish
		ΔDO	FY	GR				
C1	desmetryne	0.0056	0.0080	0.0191	11.5	-	-	10
	hexazinone	0.0135	0.0158	0.0240	-	-	274	-
	metribuzin	0.0148	0.0125	0.0327	-	85	-	-
	bromacil	0.0082	0.0065	0.0244	-	162.8	183	-
C2	monolinuron	0.2102	0.3233	0.9406	55 ^a	-	-	50 ^a
	ethidimuron	0.0502	0.0454	0.0930	-	-	-	-
	fenuron	0.9697	0.6648	1.5833	610	-	-	-
	tebuthiuron	0.0538	0.0305	0.0889	-	-	180	160
C3	bentazon	1.0010	0.5628	2.0791	-	136	-	-
K1	oryzalin	0.0581	0.0371	0.1451	-	-	-	-
	propyzamide	0.8226	0.2817	0.9324	150	-	-	350
	tebutam	6.1828	4.5749	8.3594	-	-	-	-
K2	carbetamide	0.2239	0.9348	3.0223	-	-	-	-
K3	dimethachlor	0.0090	0.0083	0.0176	-	-	-	-
	propachlor	0.0172	0.0236	0.0429	-	-	-	-
O	dicamba	21.421	18.213	23.982	-	180	-	40
	chloramben	14.003	12.797	15.565	-	-	-	-
	clopyralid	16.005	2.835	13.303	-	-	-	-
	picloram	8.6986	3.8616	11.271	-	-	55.3	-
	triclopyr	10.227	4.4241	8.2844	-	-	-	-

F. minnow-*Pimephales promelas*

Guppy-*Poecilia reticulata*

Goldfish-*Carassius auratus*

S. minnow-*Cyprinodon variegates*

* the unit is mg/L

a=24h

Table 5.4.2 Comparisons of algal toxicity test results with literature data ⁽⁸¹⁾

Group	Toxicants	<i>P. subcapitata</i> BOD test, 48h-EC ₅₀			<i>Daphnia magna</i>	Rainbow trout
		ΔDO	FY	GR	48h-EC ₅₀	96h-LC ₅₀
C1	desmetryne	0.0056	0.0080	0.0191	26	-
	hexazinone	0.0135	0.0158	0.0240	151.6	286 ^b
	metribuzin	0.0148	0.0125	0.0327	43 ^a	147
	bromacil	0.0082	0.0065	0.0244	121	36
C2	monolinuron	0.2102	0.3233	0.9406	-	-
	ethidimuron	0.0502	0.0454	0.0930	-	-
	fenuron	0.9697	0.6648	1.5833	-	204
	tebuthiuron	0.0538	0.0305	0.0889	297	143
C3	bentazon	1.0010	0.5628	2.0791	64	100
K1	oryzalin	0.0581	0.0371	0.1451	1.5	3.26
	propyzamide	0.8226	0.2817	0.9324	5.6	72
	tebutam	6.1828	4.5749	8.3594		
K2	carbetamide	0.2239	0.9348	3.0223	-	-
K3	dimethachlor	0.0090	0.0083	0.0176	-	-
	propachlor	0.0172	0.0236	0.0429	7.8	0.42
O	dicamba	21.421	18.213	23.982	110.7	135.4
	chloramben	14.003	12.797	15.565	-	-
	clopyralid	16.005	2.8346	13.303		
	picloram	8.6986	3.8616	11.271	68.3	8
	triclopyr	10.227	4.4241	8.2844	132.9	117

R. trout-Oncorhynchus mykiss

* the unit is mg/L

a=96h b=48h

Table 5.4.3 Test condition list of other toxicity tests

Group	Toxicants	BOD test, 48h-EC ₅₀ (mg/L)			<i>P. subcapitata</i> EC ₅₀ (mg/L)	Test Conditions
		ΔDO	FY	GR		
C1	hexazinone	0.0135	0.0158	0.024	0.0245 ⁽⁵²⁾	AAP media, 96h, biomass 20,000 cells/mL
	metribuzin	0.0148	0.0125	0.0327	0.043 ⁽⁷⁰⁾	ASTM media, 96h, biomass 20,000 cells/mL
	bromacil	0.0082	0.0065	1.9156	0.0068 ⁽⁸¹⁾	--
C2	tebuthiuron	0.0538	0.0454	0.0889	0.102 ⁽⁸²⁾	AAP media, 96h, biomass 20,000 cells/mL
C3	bentazone	1.001	0.5628	2.0791	4.5 ⁽⁸¹⁾	--
K1	oryzalin	0.0581	0.0371	0.1451	0.042 ⁽⁸¹⁾	--
	propyzamide	0.8226	0.2817	0.9324	0.76 ⁽⁸¹⁾	--
O	dicamba	21.421	18.213	23.982	36.375 ⁽⁷⁰⁾	ASTM media, 96h, biomass 20,000 cells/mL
	picloram	8.6986	3.8616	11.271	22.7 ⁽⁵²⁾	AAP media, 96h, biomass 20,000 cells/mL
	triclopyr	10.227	4.4241	8.2844	32.5 ⁽⁸¹⁾	--

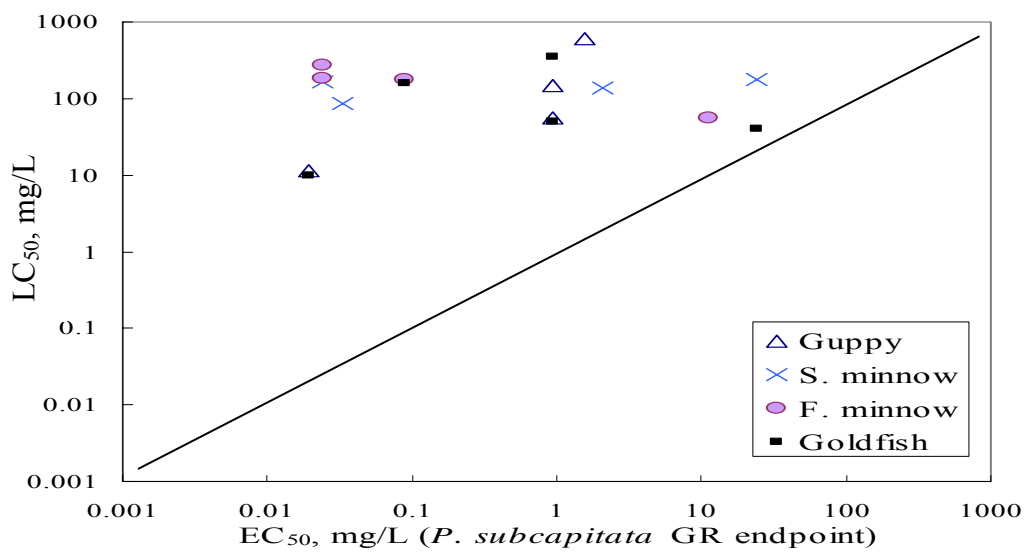
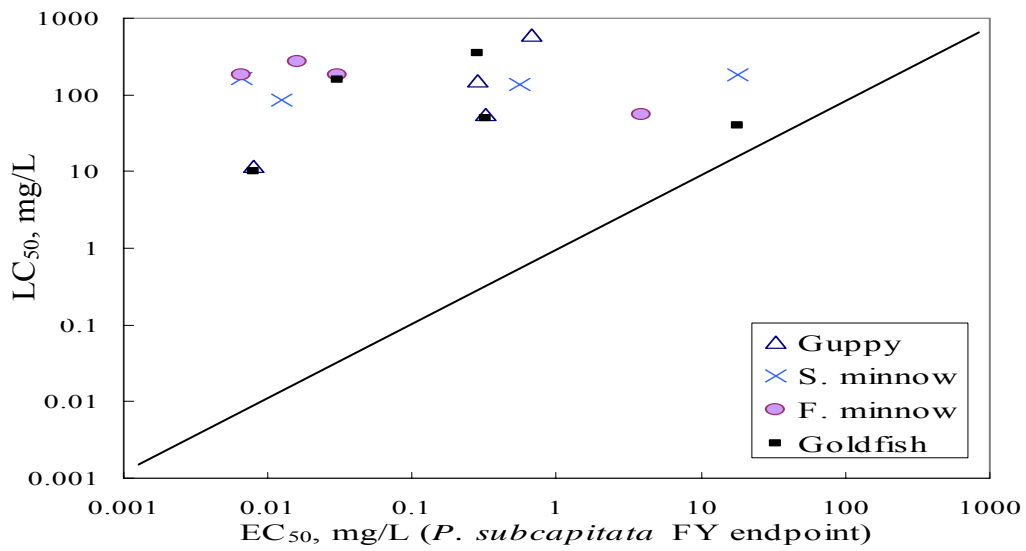
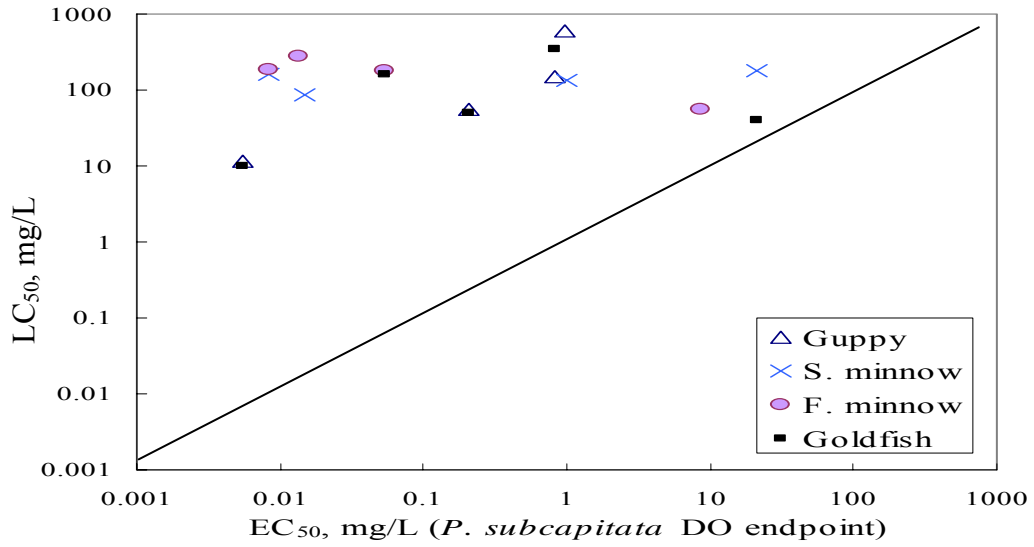


Fig 5.4.1 Comparison of relative sensitivity of *P. subcapitata* and other species

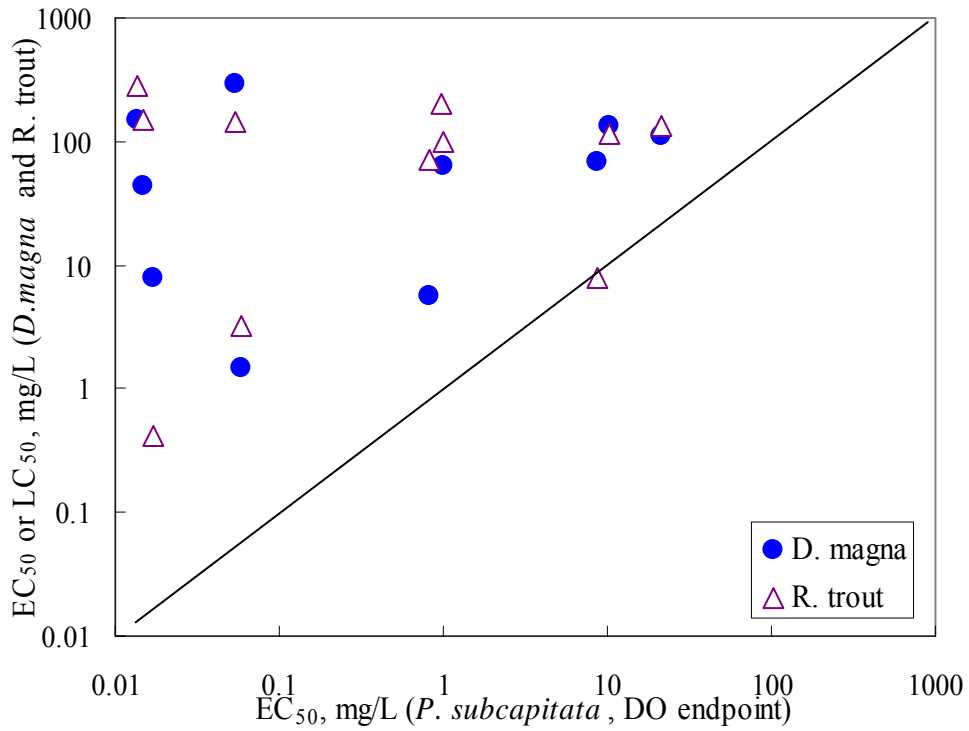
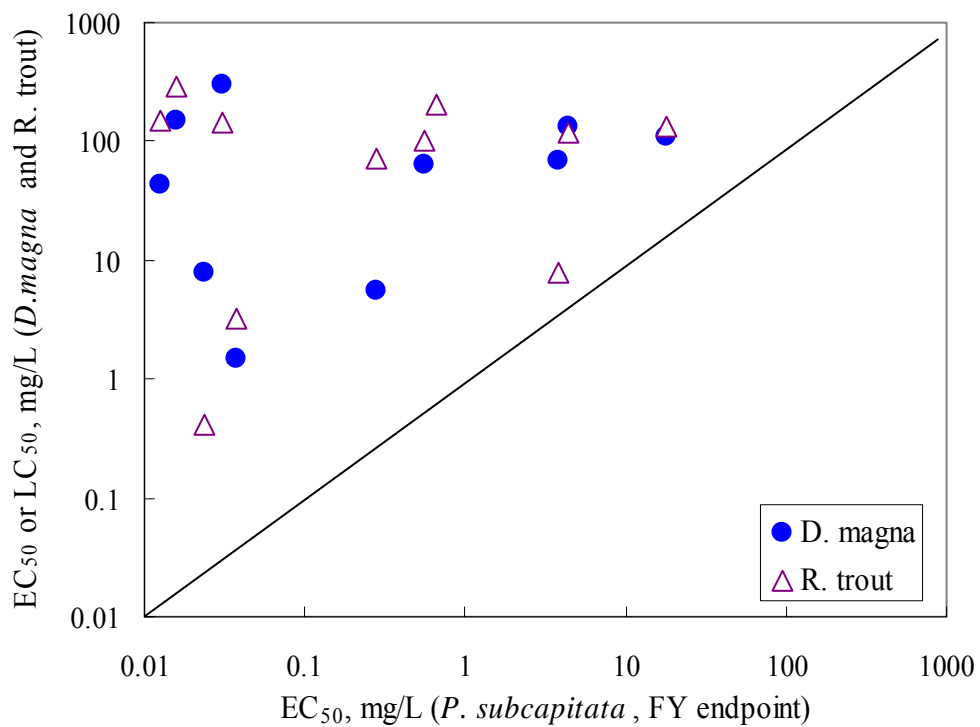


Fig 5.4.2 Comparison of relative sensitivity of *P. subcapitata*, *D. magna* and R. trout, based on DO



5.4.3 Comparison of relative sensitivity of *P. subcapitata*, *D. magna* and R. trout, based on Final Yield

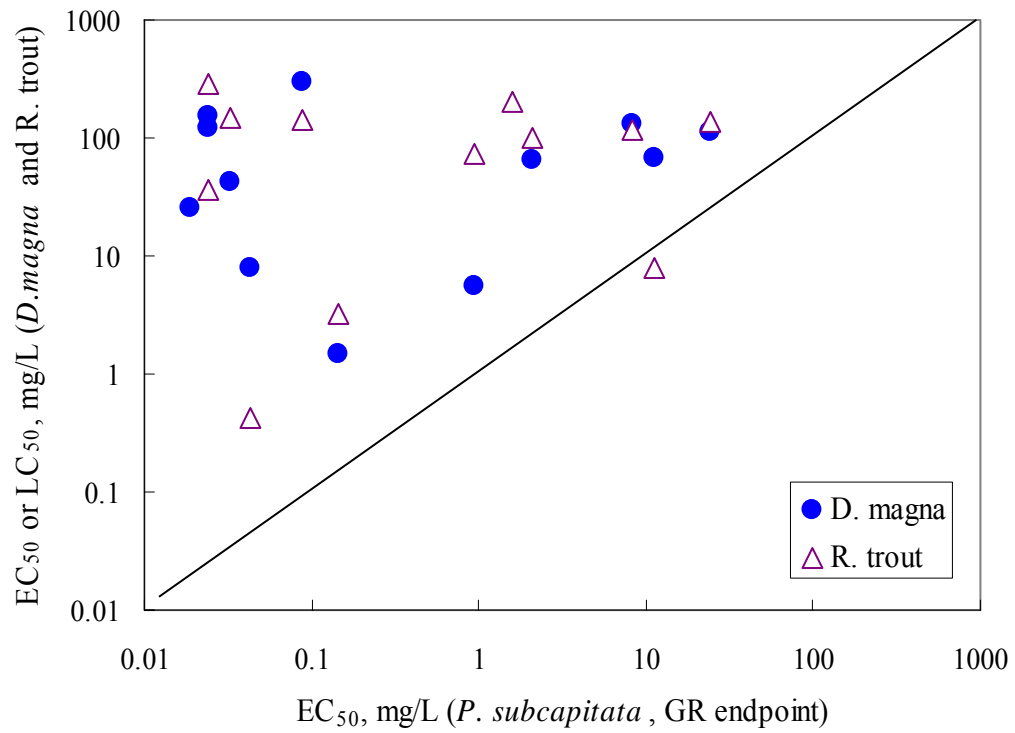
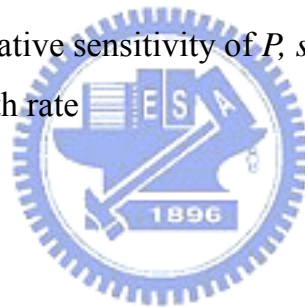


Fig 5.4.4 Comparison of relative sensitivity of *P. subcapitata*, *D. magna* and R. trout, based on Growth rate



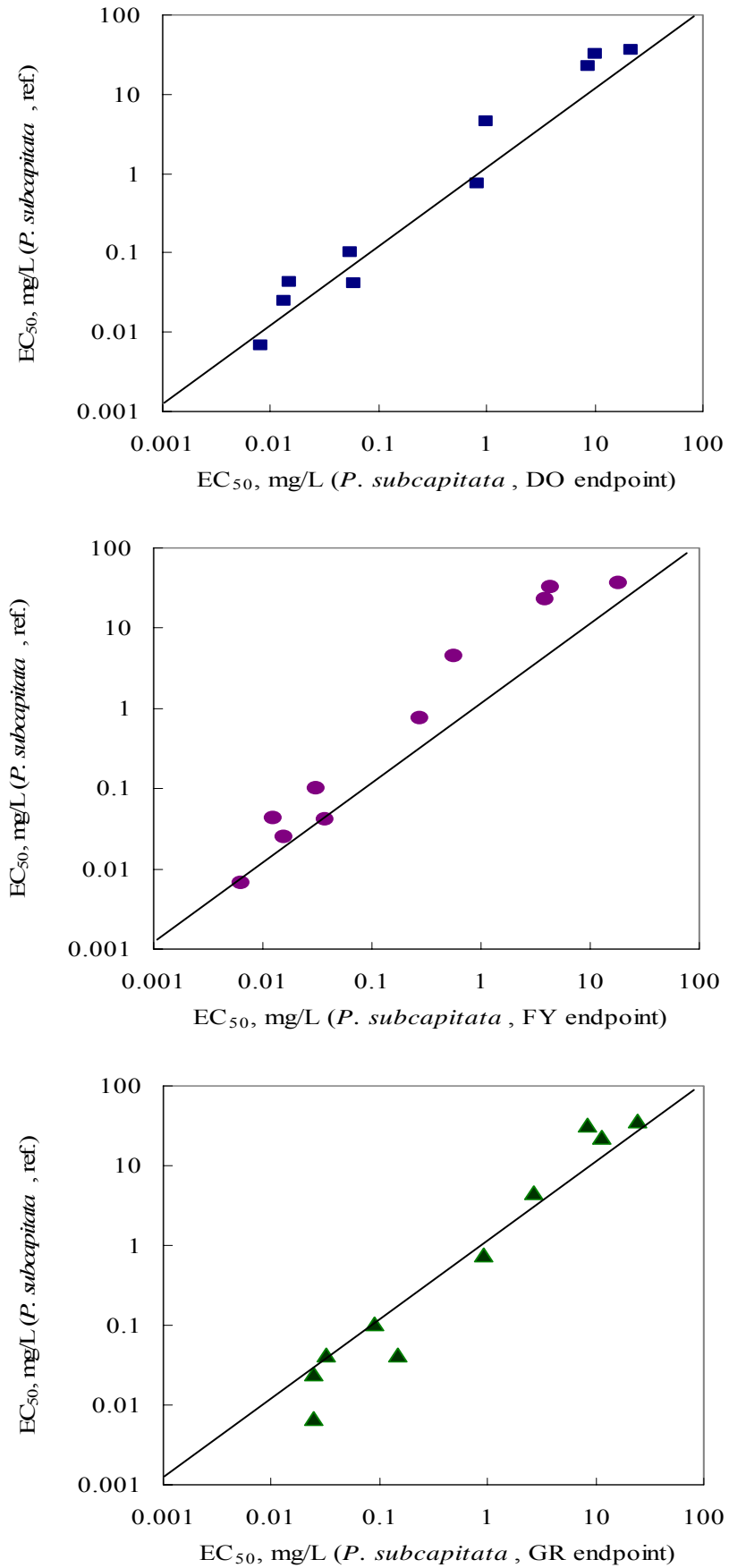


Fig 5.4.5 Relationship between this toxicity and other literature data

Table 5.4.4 Comparison between conventional and this algal toxicity tests

Group	Toxicants	EC ₅₀	EC ₅₀ -ref.	EC ₅₀ -ratio	Log(V.P.)
C1	hexazinone	0.0158	0.025	1.5462	-1.5227
	metribuzin	0.0125	0.043	3.4472	-1.2364
	bromacil	0.0065	0.0068	1.0498	-1.3878
C2	tebuthiuron	0.0305	0.102	3.3474	-0.5739
C3	bentazon	0.5628	4.500	7.9962	-0.3371
K1	oryzalin	0.0371	0.042	1.1306	-2.8859
	propyzamide	0.2817	0.760	2.6979	-1.2364
O	dicamba	18.213	36.375	1.9972	0.6540
	picloram	3.8616	22.700	5.8784	-5.0170
	triclopyr	4.4241	32.500	7.3461	-0.7745

V.P.: Vapor pressure, the unit is mPa

*EC₅₀: Final Yield endpoint

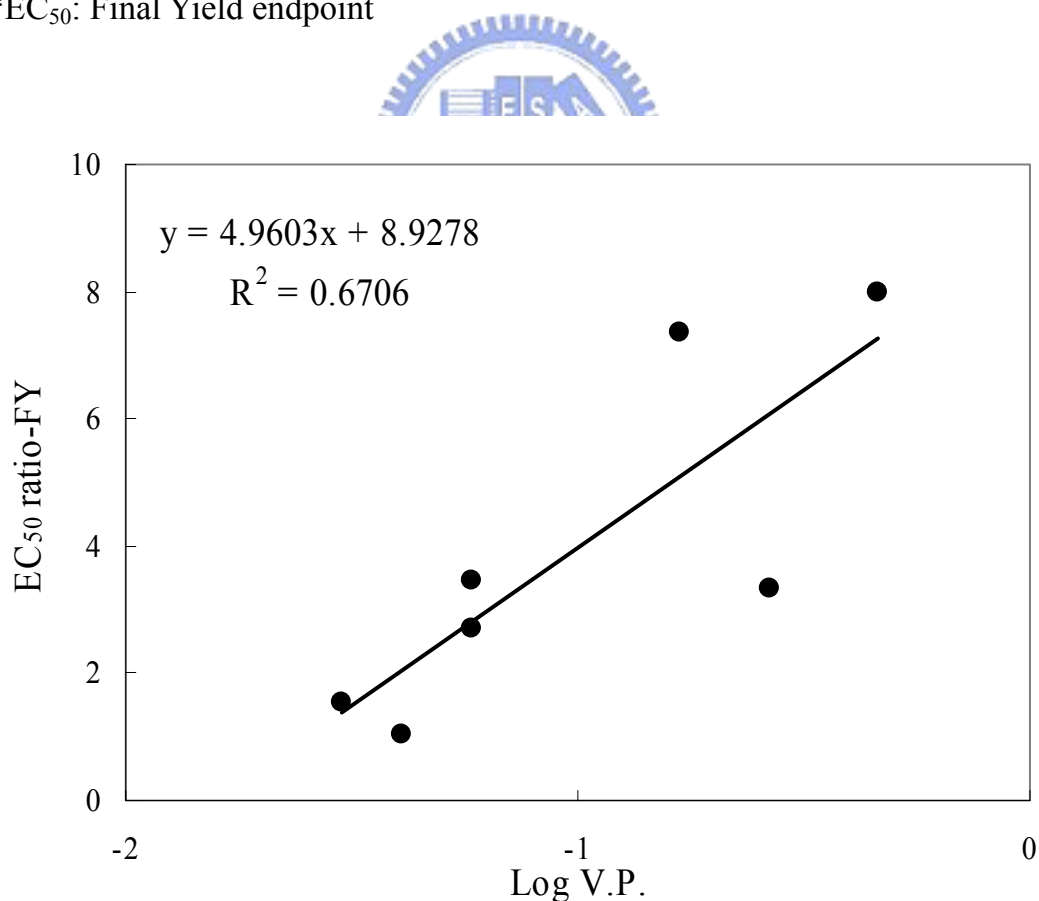


Fig 5.4.6 Correlation between EC₅₀ ratio and vapor pressure
(except for oryzalin, dicamba and picloram)

5.5 QSAR

QSAR 最初用於製藥及醫藥部份。在 70 年代時，QSAR 才被引入環境工程學中應用。所謂 QSAR，是以有機物的物理特性，化學特性及結構間的性質與毒性建立起統計上的關係，環境學者可以由化學物質的物理特性，預測其毒性，以運用在環境影響評估的範疇。儘管製藥及醫學工業早已經使用 QSAR 於許多特殊生化機制，而在環工領域，QSAR 的應用尚侷限在非反應性有機物麻醉作用上，少數反應性有機物實驗結果亦不佳。環境毒理學家著重在有機物之毒性及其對於生物活動之抑制性；生態學家及環境工程師則是著重在有機物之分解過程及其對環境生態之影響。

本實驗將 20 種除草劑的 EC50 值與不同參數來進行相關性間的探討，因為這部份過去的文獻資料並不多，故這類毒性物質的 QSAR 建立之必要性也相對地提高。因此本實驗的數據也以不同參數來建立 QSAR。Table 5.5.1 與 Table 5.5.2 為三種試驗終點之毒性數據、所用到的參數值與迴歸結果的相關性。

結果顯示出毒性數據與其他參數值之間的相關性並不佳， R^2 大多小於 0.5，並無法建立良好的 QSAR，並且不足以可以應用在其他相同毒性機制的毒物上。這可能是因本實驗所選擇的毒性物質並非為同類型之物質，雖是僅以三種作用機制的分別，但是化學結構上的分類卻跨越了 9-10 種的組別，差異性太大，所以可能因此無法找出良好的相關性。

若是分別由細部的結構來做進一步的討論，可以透過結構式概括地找出 4 組相似的結構，藉著利用 Final Yield 反應參數來淺略的比較不同取代基所造成的毒性差異。由 Table 5.5.3 中可看出，取代基的不同及有無的確會增強除草劑的毒性（例如：Monolinuron 的毒性比 Fenuron 強），但這只能算是初步的解釋，因為數據上並不是很多，可能要再收集更多的資料後才能有進一步的比較與討論。

Table 5.5.1 EC₅₀ value in three endpoints and other parameter about herbicides

Toxicants	Log (1/EC ₅₀)			Heat of Formation (Kcal)	Electronic Energy (EV)	Core-core repulsion (EV)	Dipole	Ionization potential (EV)	Homo (EV)	Lumo (EV)	Homo-Lumo gap (EV)	Log K _{ow}
	ΔDO	Final yield	Growth rate									
desmetryne	7.584	7.428	7.049	55.69	-14256	11796	2.28	8.68	-8.68	0.52	9.20	2.38
hexazinone	7.272	7.202	7.022	-35.68	-22151	18871	3.73	10.20	-10.20	-0.35	9.85	1.85
metribuzin	7.160	7.235	6.817	32.55	-14902	12344	2.04	8.89	-8.89	0.81	9.70	1.7
bromacil	7.501	7.605	7.029	-60.13	-15039	12300	3.81	9.52	-9.52	-0.50	9.02	2.11
monolinuron	6.009	5.822	5.358	-9.02	-13997	11267	3.66	8.88	-8.88	-0.07	8.81	2.3
ethidimuron	6.721	6.765	6.454	-32.57	-18274	15037	9.35	9.62	-9.62	-1.22	8.40	-0.22
fenuron	5.229	5.393	5.016	0.76	-10643	8592	3.59	8.74	-8.74	0.22	8.96	0.98
tebuthiuron	6.627	6.875	6.410	21.92	-16165	13451	3.05	9.49	-9.49	-0.60	8.89	1.79
bentazon	5.380	5.630	5.063	-75.02	-18044	15030	3.43	9.69	-9.69	-1.10	8.59	2.34
oryzalin	6.775	6.970	6.378	-44.40	-33056	28334	3.71	9.89	-9.89	-1.81	8.08	3.73
propyzamide	5.493	5.959	5.439	28.38	-15928	12967	2.95	9.89	-9.89	-0.57	9.32	3.43
tebutam	4.577	4.708	4.446	-30.05	-19801	17037	3.26	9.36	-9.36	0.49	9.85	3
carbetamide	6.023	5.403	4.893	-97.79	-18461	15329	2.44	8.86	-8.86	0.32	9.18	1.63
dimethachlor	7.451	7.487	7.162	-71.48	-19930	16796	2.64	9.58	-9.58	-0.02	9.56	2.17
propachlor	7.089	6.953	6.693	-20.70	-14299	11797	3.31	9.43	-9.43	0.00	9.43	2.18
dicamba	4.014	4.084	3.965	-109.43	-13002	10186	1.85	9.79	-9.79	-0.73	9.06	2.21
chloramben	4.168	4.207	4.122	-77.87	-11047	8486	2.49	9.06	-9.06	-0.63	8.43	1.9
clopyralid	4.079	4.831	4.159	-58.42	-9573	7168	5.35	10.27	-10.27	-1.22	9.05	1.06
picloram	4.443	4.796	4.331	-66.82	-12885	9899	5.82	9.70	-9.70	-1.20	8.50	1.36
triclopyr	4.399	4.763	4.491	-104.36	-14249	11009	1.99	9.59	-9.59	-0.92	8.67	2.53

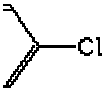
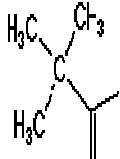
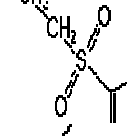
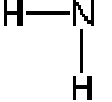
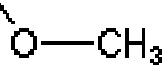
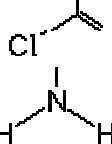
* EC₅₀ unit is mole/L

Table 5.5.2 Relationships between the toxicity data and other parameters

Parameters	Δ DO		Final Yield		Growth Rate	
eLumo (EV)	$Y=0.171X-1.441$	$R^2=0.099$	$Y=0.125X-1.179$	$R^2=0.045$	$Y=0.152X-1.283$	$R^2=0.063$
eHomo (EV)	$Y=0.064X-9.831$	$R^2=0.031$	$Y=0.019X-9.569$	$R^2=0.002$	$Y=0.027X-9.608$	$R^2=0.005$
Homo-Lumo gap (EV)	$Y=0.108X+8.391$	$R^2=0.078$	$Y=0.106X+8.390$	$R^2=0.064$	$Y=0.125X+8.325$	$R^2=0.085$
Log K_{ow} *	$Y=0.265X+5.289$	$R^2=0.021$	$Y=0.274X+5.380$	$R^2=0.026$	$Y=0.270X+4.993$	$R^2=0.027$
Dipole	$Y=0.026X+3.387$	$R^2=0.0004$	$Y=0.106X+2.899$	$R^2=0.006$	$Y=0.070X+3.147$	$R^2=0.002$
Heat of formation (Kcal)	$Y=17.72X-142.3$	$R^2=0.228$	$Y=20.97X-163.7$	$R^2=0.271$	$Y=20.95X-155.3$	$R^2=0.259$
Electronic Energy (EV)	$Y=-1719X-6139$	$R^2=0.186$	$Y=-1834X-5267$	$R^2=0.180$	$Y=-1830X-6008$	$R^2=0.171$
Core-core repulsion (EV)	$Y=1643X+3689$	$R^2=0.206$	$Y=1747X+2892$	$R^2=0.198$	$Y=1749X+3652$	$R^2=0.189$
Ionization potential (EV)	$Y=-0.064X+9.831$	$R^2=0.031$	$Y=-0.019X+9.569$	$R^2=0.002$	$Y=-0.027X+9.608$	$R^2=0.005$
eLumo + Log K_{ow} *	$Y=0.783X_1+0.418X_2+5.266$		$Y=0.533X_1+0.377X_2+5.366$		$Y=0.605X_1+0.388X_2+4.975$	
	$R^2=0.187$		$R^2=0.116$		$R^2=0.150$	

* except for ethidimuron

Table 5.5.3 The toxicity data and different places of the structure

Toxicants	EC ₅₀			Different places
	ΔDO	Final Yield	Growth Rate	
Fenuron	0.9697	0.6648	1.5833	---
I Monolinuron	0.2102	0.3233	0.9406	
Tebuthiuron	0.0538	0.0305	0.0889	
II Ethidimuron	0.0502	0.0454	0.0930	
III Chloramben	14.003	12.797	15.565	
Dicamba	21.421	18.213	23.982	
Clopyralid	16.005	2.8346	13.303	---
IV Picloram	8.6986	3.8616	11.271	

* EC₅₀ unit is mg/L