

~ 目錄 ~

表次	頁次
中文摘要	I
英文摘要	II
目錄	IV
表目錄	VII
圖目錄	IX
符號表	XI
苯甲醛類中英文名對照表	XII
第一章、緒論	1
1.1 研究緣起	1
1.2 研究目的	3
1.3 研究方法及架構	4
第二章、文獻回顧	6
2.1 毒性物質-醛及苯甲醛之介紹	6
2.1.1 醛的定義	6
2.1.2 醛的來源	6
2.1.3 醛類化合物之物化性質	7
2.1.4 醛類化合物之毒性作用機制	7
2.2 常用的毒性試驗物種	8
2.2.1 Microtox 測試	9
2.2.2 Polytox 測試	9
2.2.3 水蚤(<i>Daphnia</i>)測試	10
2.2.4 纖毛蟲(<i>Tetrahymena pyriformis</i>)測試	10
2.2.5 植物及藻類測試	11
2.3 藻類毒性試驗	11
2.3.1 試驗物種簡介	11
2.3.2 藻類計數方法	12
2.3.3 藻類毒性試驗	13
2.3.4 試驗之重要參數	16
2.3.5 觀測終點(End point)之量測	21
2.3.6 揮發性有機物實驗	21
2.4 有機物結構與毒性之關係	22
2.5 定量結構-反應關係(QSAR)	23
2.5.1 QSAR 之簡介	23
2.5.2 常用之 QSAR 參數	25

2.5.3 QSAR 在環境毒物學上的應用	28
2.6 化合物作用的毒性機制	30
2.7 Surrogate 於環境毒理學上的應用	31
2.8 Acute and Chronic Ratio (ACR)	32
2.9 Solvent control	34
第三章、基本理論	36
3.1 毒性試驗終點種類	36
3.2 常用的單一毒性模式	37
3.3 基本生長動力學	40
3.4 模式最佳化選擇	42
3.5 NOEC 與 Cut-Off value	42
3.5.1 判定 NOEC 和 LOEC	42
3.5.2 平均中斷值 (Cut-Off value)	43
3.5.3 NEC	43
第四章、實驗設備與方法	46
4.1 實驗設備及材料	46
4.2 毒性試驗藻種	54
4.3 實驗前準備	54
4.3.1 培養基質的配製	54
4.3.2 玻璃器皿清洗與滅菌	56
4.3.3 盤面光度之調整	56
4.3.4 藻類之培養步驟及裝置	58
4.3.5 ISOTON II 之配製	58
4.3.6 COD-比色法藥品配製	59
4.3.7 電子顆粒計數器操作方式與原理	59
4.4 儀器操作原理、步驟與設定條件	62
4.4.1 COD-比色法	62
4.4.2 高效能液相層析儀 (High Performance Liquid Chromatography, HPLC)	63
4.5 密閉式藻類毒性試驗方法及步驟	66
4.5.1 實驗方法	66
4.5.2 實驗步驟	66
4.6 實驗之品保及品管(QA/QC)	71
第五章、結果與討論	74
5.1 藻類毒性試驗數據	74
5.2 苯甲醛類結構與毒性	89
5.3 最佳化模式	92
5.4 EC ₁₀ 值與 NOEC、LOEC、NEC 值之比較	98

5.5 急慢性比(Acute-Chronic Toxicity Ratio ; ACR).....	105
5.6 密閉式 BOD 瓶藻類毒性試驗與其他物種試驗之比較	108
5.7 QSAR 分析	111
第六章、結論與建議	118
6.1 結論.....	118
6.2 建議.....	119
第七章、參考文獻.....	119
附錄一、原始數據	
附錄二、檢量線(HPLC)	



~ 表 目 錄 ~

Table 2.2.1、Toxicity experiment methods.....	9
Table 2.5.1、QSAR 分析中的 outliers 毒性機制分類表.....	30
Table 2.5.2、The solvent control of DMSO in algal toxicity tests.....	35
Table 3.2.1、Weibull、Probit 與 Logit 容忍度分布模式	39
Table 4.1.1、Physical and chemical characteristics of benzaldehydes.....	50
Table 4.3.1、The consist of macro-algal medium.....	55
Table 4.3.2、The consist of micro-algal medium.....	56
Table 4.3.3、The display of luminosity upper the shaker($\mu\text{Em}^{-2}\text{s}^{-1}$).....	57
Table 4.3.4、The conditions of Coulter Counter.....	60
Table 4.4.1、The analysis conditions and apparatuses of HPLC	64
Table 5.1.1、The raw data of algal toxicity test about 2,5-dihydroxybenzaldehyde ..	75
Table 5.1.2、Median effective concentration values(EC_{50})based on three end-point.	78
Table 5.2.1、The relationships between toxicity and structure of hydroxy- benzaldehydes.....	90
Table 5.3.1、G values of dissolved oxygen production in three models.....	94
Table 5.3.2、G values of Final yield in three models.....	95
Table 5.3.3、G values of Growth rate in three models.....	96
Table 5.4.1、Comparison relative sensitivity of different toxicity tests based on benzaldehyde toxicity.....	100
Table 5.4.2、The relationship of NOEC and EC_{10}	102
Table 5.4.3、The important statistical parameters in three test end-points	103
Table 5.4.4、The relationship of LOEC、 EC_{10} and NEC	104
Table 5.5.1、The ACR values in three test end-points	107
Table 5.6.1、Comparison of algal toxicity test results with other species	110

Table 5.7.1 、 The experiment values and predict values in hydroxybenzaldehydes . 113
Table 5.7.2 、 Physical and chemical parameters of benzaldehydes..... 116
Table 5.7.3 、 Relationships between the toxicity data and other parameters 117



~ 圖 目 錄 ~

Fig 1.3.1	、 The flow chart of this investigation.....	5
Fig 2.3.1	、 Carbonate system and photosynthesis method for pH balance	17
Fig 2.5.1	、 Classification of toxicity mechanism in aquatic toxicity tests	29
Fig 3.2.1	、 Dose-response curve of common toxicity test	37
Fig 3.5.1	、 Mean function of linear decay.....	45
Fig 3.5.2	、 Mean function of exponential decay.....	45
Fig 4.1.1	、 The flow chart of stock solution manufacture.....	53
Fig 4.3.1	、 調整後之盤面光度區面圖(單位: $\mu\text{Em}^{-2}\text{s}^{-1}$)	57
Fig 4.3.2	、 The culteur steps of algal	61
Fig 4.4.1	、 Setting and operate step of COD-colorimetry.....	63
Fig 4.4.2	、 Setting and operate step of HPLC	65
Fig 4.5.1	、 The flow chart in close-system algal toxicity test	67
Fig 4.5.2	、 The diffuser system of deion-water	68
Fig 4.6.1	、 The quality control of algae cells density	73
Fig 4.6.2	、 The quality control of mean cells volume.....	73
Fig 5.1.1	、 The toxicity response of the algal three end-point	77
Fig 5.1.2	、 The special toxicity reation of benzaldehyde in algal test	77
Fig 5.1.3	、 The Dose-response Curve of 2,5-dimethoxybenzaldehyde	79
Fig 5.1.4	、 The Dose-response Curve of 2,4-dimethoxybenzaldehyde	79
Fig 5.1.5	、 The Dose-response Curve of 4-(dimethylamino)benzaldehyde.....	80
Fig 5.1.6	、 The Dose-response Curve of 3,4,5-trimethoxybenzaldehyde	80
Fig 5.1.7	、 The Dose-response Curve of 4-chlorobenzaldehyde.....	81
Fig 5.1.8	、 The Dose-response Curve of 4-bromobenzaldehyde.....	81
Fig 5.1.9	、 The Dose-response Curve of 5-hydroxy-2-nitrobenzaldehyde	82

Fig 5.1.10	、 The Dose-response Curve of 3-bromo-4-hydroxybenzaldehyde	82
Fig 5.1.11	、 The Dose-response Curve of 4-ethoxy-3-methoxybenzaldehyde	83
Fig 5.1.12	、 The Dose-response Curve of 2,4-dihydroxybenzaldehyde	83
Fig 5.1.13	、 The Dose-response Curve of 4-nitrobenzaldehyde	84
Fig 5.1.14	、 The Dose-response Curve of 3-ethoxy-4-hydroxybenzaldehyde	84
Fig 5.1.15	、 The Dose-response Curve of 3,4-dihydroxybenzaldehyde	82
Fig 5.1.16	、 The Dose-response Curve of 2-chloro-6-fluorobenzaldehyde	85
Fig 5.1.17	、 The Dose-response Curve of 3,4-dimethoxybenzaldehyde	86
Fig 5.1.18	、 The Dose-response Curve of 2,5-dihydroxybenzaldehyde	86
Fig 5.1.19	、 The Dose-response Curve of benzaldehyde	87
Fig 5.1.20	、 The Dose-response Curve of 4-ethoxy-3-methoxybenzaldehyde	87
Fig 5.1.21	、 The Dose-response Curve of 5-bromo-2-hydroxybenzaldehyde	88
Fig 5.1.22	、 The Dose-response Curve of 4-ethoxybenzaldehyde	88
Fig 5.2.1	、 The relationships between toxicity and structure of hydroxybenzaldehydes	91
Fig 5.3.1	、 The Dose-response Curve between Weibull and Probit model	97
Fig 5.6.1	、 Comparison of relative sensitivity of <i>P.subcapitata</i> and other species ...	109
Fig 5.7.1	、 Plot of experiment values versus predict values in hydroxybenzaldehydes based on Final yield	113
Fig 5.7.2	、 Plot of experiment values versus predict values in hydroxybenzaldehydes based on Growth rate	114
Fig 5.7.3	、 QSAR analysis of the eight hydroxybenzaldehydes.....	117

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
Δ DO	Delta Dissolve Oxygen	溶液中溶氧之增加量	mg/l
EC _x	X % Effect Concentration	引起 X % 影響效應之濃度	mg/l
log K _{ow}	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	$\mu\text{m}^3/\text{cell}$
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
E _{HOMO}	Highest occupied molecular orbit	最高佔用分子軌道	EV
E _{LUMO}	Lowest unoccupied molecular orbit	最低未用分子軌道	EV
LSER	Linear salvation energy relationship	線性溶劑能量關係	-
TLSER	Theoretical linear salvation energy relationship	理論線性溶劑能量關係	-

苯甲醛類中英文名對照表

英文名	中文名
3-ethoxy-4-hydroxybenzaldehyde	3-乙氧-4-羥基苯甲醛
3-bromo-4-hydroxybenzaldehyde	3-溴-4-羥基苯甲醛
3,4,5-trimethoxybenzaldehyde	3,4,5-三甲氧基苯甲醛
4-ethoxy-3-methoxybenzaldehyde	4-乙氧-3-甲氧基苯甲醛
3,4-dimethoxybenzaldehyde	3,4-二甲氧基苯甲醛
4-hydroxy-3-methoxybenzaldehyde	香草醛
Benzaldehyde	苯甲醛
4-Nitrobenzaldehyde	4-硝基苯甲醛
2,4-dihydroxybenzaldehyde	2,4-二羥基苯甲醛
2-Chloro-6-fluorobenzaldehyde	2-氯-6-氟苯甲醛
2,4-dimethoxybenzaldehyde	2,4-二甲氧基苯甲醛
3,4-dihydroxybenzaldehyde	3,4-二羥基苯甲醛
4-Chlorobenzaldehyde	4-氯苯甲醛
2,5-dimethoxybenzaldehyde	2,5-二甲氧基苯甲醛
2,5-dihydroxybenzaldehyde	2,5-二羥基苯甲醛
5-bromo-2-hydroxybenzaldehyde	5-溴-2-羥基苯甲醛
4-(dimethylamino)benzaldehyde	4-二甲氨基苯甲醛
4-bromobenzaldehyde	4-溴苯甲醛
5-hydroxy-2-nitrobenzaldehyde	5-羥-2-硝基苯甲醛
4-ethoxybenzaldehyde	4-乙氧基苯甲醛