

水質分析

應用高解析質譜法探討以再生水供灌對水稻小分子分布之影響 Applying High-resolution Mass Spectrometry to Investigating The Small-molecule Changes in Rice due to Reclaimed Water Irrigation

林耕睿^{1*}, 陳玟伶^{1,2}, 劉振宇³, 陳豐文⁴, 卓宇謙⁴, 李金靖³, 王尚禮²

¹臺灣大學公共衛生學院食品安全與健康研究所 R11851004@ntu.edu.tw

²臺灣大學生物資源暨農學院農業化學系

³桃園市政府水務局

⁴社團法人農業工程研究中心

摘要

氣候變遷加劇水資源缺乏。農業佔臺灣水資源用量的 70%，將再生水用於灌溉稻作，可能減緩農業水資源問題。然而再生水的性質與組成和傳統灌溉水不同，對稻米安全與品質的影響有許多未知。本研究利用高解析質譜法篩查灌溉水中小分子污染物，並透過非目標分析法解析稻米小分子指紋，探討再生水灌溉對稻作健康與稻米安全的影響。

本研究進行粳稻栽種之田間試驗，實驗組與對照組分別以再生水及溪水灌溉。再生水來自某水資源回收中心，而溪水為當地既有之灌溉水源。試驗期間採集實際用於灌溉稻作之再生水與溪水（樣本數均為 10），以固相萃取法進行前處理。並於 7 月及 12 月共採集兩期作以再生水與溪水灌溉之稻米（樣本數分別為 66 及 68）。水稻植株以鐮刀採收，稻米樣本經脫粒、脫殼、精白後均質，再經過溶劑萃取及淨化。

所有樣本皆以液相層析—四極桿飛行時間質譜儀分析。灌溉水透過比較樣本中小分子與資料庫中約 2800 個污染物的高解析質譜資料，完成污染物定性篩查。稻米的高解析質譜資料以同位素標記化學品校正批次效應後，利用多變量分析法建立灌溉水源鑑別模型，並篩選 variable importance in projection (VIP) 值大於 1 的小分子作為候選指標物。

研究結果發現再生水及溪水中分別有 66 及 30 種污染物的檢出率高於 30%。兩種灌溉水中檢出率高的污染物均以藥物為主，然而種類有明顯差異。有 43 種污染物僅於再生水中測得，包含臺灣近兩年使用量高且污水處理之去除率低之污染物，例如抗憂鬱劑 sulpiride 及鎮定劑 carbamazepine。另有 7 種污染物僅出現在溪水中，如人類大量使用的咖啡因，代表溪水遭受廢污水污染；反之，於再生水中未測得咖啡因，代表污水處理流程能夠有效將其移除。

以第一及第二期作稻米之小分子相對定量結果分別建構的最小平方判別分析模型均成功鑑別了實驗組與對照組 ($R^2 > 0.926$, $Q^2 > 0.834$)，代表以再生水與溪水灌溉之稻米的小分子指紋相異。正離子與負離子模型中，分別有 984 及 1079 個小分子的 VIP 值大於 1，為可能在兩組稻米中相對濃度有顯著差異的候選指標物，本研究將進一步篩選與鑑定指標物，討論其來源、用途、對水稻生理的作用、以及對人體的毒性。

本研究已完成再生水與溪水的小分子污染物定性分析、以及稻米小分子指紋之模型建構。稻米的小分子組成不同呼應了灌溉水的小分子污染物種類分佈差異。待後續完成指標物鑑定，將能了解再生水灌溉與稻作健康及稻米食品安全的關係。

關鍵字：高解析質譜、稻米、再生水灌溉、小分子指紋

Keywords: High-resolution mass spectrometry, rice, reclaimed water irrigation, small-molecule fingerprint