

# 国内外农药相关数据库建设现状分析

董书衡<sup>1</sup>, 张心悦<sup>1</sup>, 魏兰馨<sup>1</sup>, 沈翎翔<sup>1</sup>, 周蓉<sup>2,3</sup>, 刘冉<sup>1</sup>

1. 东南大学公共卫生学院环境医学工程教育部重点实验室, 江苏 南京 210009
2. 生态环境部南京环境科学研究所化学品生态效应与固体废物污染防治研究中心, 江苏 南京 210042
3. 国家环境保护农药环境评价与污染控制重点实验室, 江苏 南京 210042

## 摘要:

化学农药的大规模使用对生态环境和人类健康都造成了诸多影响。在开展环境污染物风险评估、环境污染治理、农药管理、生态毒理学等方向的研究时, 系统的农药相关数据库平台是不可缺少的基础支持。本综述介绍了欧洲食品安全局 OpenFoodTox 数据库、美国环境保护局 CompTox Chemicals Dashboard 数据库、农药特性数据库 (PPDB)、农药行动网络 (PAN)、美国生态毒理数据库 (ECOTOX)、毒理学数据网络 (TOXNET) 六个国外常用农药相关数据库的概况及特点, 同时比较了六个数据库的可查询数据内容及优缺点, 分析了其在农药风险管理中的应用。本综述也介绍了国内四个相关数据库的概况及特点, 分析了国内数据库的不足。结合我国农药污染现状及特点, 借鉴国外相关数据库建设的经验, 我国的农药毒性数据库建设迫切需要在以下几方面有所突破: 建立农药数据整编标准和规范; 建立信息完整、丰富、有效和共享的农药数据库; 注重收集中国本土生物毒性数据。

**关键词:** 毒性数据库; 农药; 风险评估; 生态毒理; 环境管理

**Status analysis on construction of domestic and foreign pesticide-related databases** DONG Shu-heng<sup>1</sup>, ZHANG Xin-yue<sup>1</sup>, WEI Lan-xin<sup>1</sup>, SHEN Xu-xiang<sup>1</sup>, ZHOU Rong<sup>2</sup>, LIU Ran<sup>1</sup> (1.Key Laboratory of Environmental Medical Engineering of Ministry of Education, School of Public Health, Southeast University, Nanjing, Jiangsu 210009, China; 2.Research Center for Chemical Ecological Effects and Solid Waste Pollution Prevention and Control, Nanjing Institute of Environmental Sciences, Ministry of Ecology and Environment of the People's Republic of China, Nanjing, Jiangsu 210042, China; 3.Key Laboratory of Pesticide Environmental Assessment and Pollution Control, Ministry of Environmental Protection, Nanjing, Jiangsu 210042, China)

## Abstract:

The extensive use of chemical pesticides has posed many impacts on ecological environment and human health. A comprehensive database platform of pesticides can play a crucial role in the research of risk assessment on environmental pollutants, pollution control, pesticide management, and ecotoxicology. This review introduced an overview of six foreign pesticide-related databases, including OpenFoodTox by European Food Safety Authority, CompTox Chemicals Dashboard by US Environmental Protection Agency, Pesticide Properties Database (PPDB), Pesticide Action Network (PAN), Ecotoxicology Database (ECOTOX), and TOXicology data NETwork (TOXNET). Their applications in pesticide risk management were analyzed by comparing the data indexes, advantages, and disadvantages of these foreign pesticide-related databases. In addition, this review also introduced the general characteristics and deficiencies of four domestic databases. Based on the characteristics of pesticide pollution in China and the experience of foreign database construction, it is urgent to make breakthroughs in establishing an authoritative pesticide-related database: standardizing pesticide data management; establishing a comprehensive, informative, valid, and shared pesticide-related database; and emphasizing on the toxicity data of indigenous Chinese species.

**Keywords:** toxicity database; pesticide; risk assessment; ecotoxicology; environmental management

DOI 10.13213/j.cnki.jeom.2020.20244

## 基金项目

国家重点研发计划 (2018YFC1801105); 江苏省高等学校大学生实践创新训练计划项目 (201910286181X)

## 作者简介

董书衡 (1999—), 男, 本科生;  
E-mail: ethandong415@163.com

## 通信作者

周蓉, E-mail: zhourong@nies.org  
刘冉, E-mail: ranliu@seu.edu.cn

利益冲突 无申报

收稿日期 2020-05-17

录用日期 2020-10-26

文章编号 2095-9982(2020)12-1211-08

中图分类号 R13

文献标志码 A

## ►引用

董书衡, 张心悦, 魏兰馨, 等. 国内外农药相关数据库建设现状分析 [J]. 环境与职业医学, 2020, 37 (12): 1211-1218.

## ►本文链接

[www.jeom.org/article/cn/10.13213/j.cnki.jeom.2020.20244](http://www.jeom.org/article/cn/10.13213/j.cnki.jeom.2020.20244)

## Funding

This study was funded.

## Correspondence to

ZHOU Rong, E-mail: zhourong@nies.org  
LIU Ran, E-mail: ranliu@seu.edu.cn

**Competing interests** None declared

**Received** 2020-05-17

**Accepted** 2020-10-26

## ►To cite

DONG Shu-heng, ZHANG Xin-yue, WEI Lan-xin, et al. Status analysis on construction of domestic and foreign pesticide-related databases[J]. Journal of Environmental and Occupational Medicine, 2020, 37(12): 1211-1218.

## ►Link to this article

[www.jeom.org/article/en/10.13213/j.cnki.jeom.2020.20244](http://www.jeom.org/article/en/10.13213/j.cnki.jeom.2020.20244)

化学农药是一种常见的环境污染物, 对生态环境和人类健康都产生了许多影响。因其使用量大, 但有效利用率低, 导致农药对生物体的影响十分明显。以中国为例, 2017年我国农药的有效利用率只有 38.8%<sup>[1]</sup>。这些农药通过消化道、呼吸道、皮肤等途径进入人体后, 可能引起急性中毒甚至死亡, 也可能不

断蓄积,造成慢性中毒,引起疾病的发生。2016年我国中毒死亡人数为4 936人,其中农药中毒死亡的人数为2 725人<sup>[1]</sup>。

随着农药种类的增加以及农产品质量安全工作的深入,农药数据日益剧增,因此实现数据管理的科学化、系统化和规范化在农药管理中十分重要。实现农药数据系统化管理的一种方法便是建立农药污染物数据库,目前国外已经建立了相对完善的农药毒理数据库。我国部分农药毒理研究需依托于国外数据库才能开展,这些数据库的数据来源大多为英文文献或具有英文摘要的非英语文献,且国外数据库中中国本土生物毒性数据较少。这使我国开展农药毒理研究、生态风险评估研究时因国内国外物种、生态结构差异性等导致研究的科学性降低。

当前,我国在开展环境污染物风险评估、环境污染物治理、农药管理、生态毒理学等方面的研究时,也常常因缺乏我国本土的基础毒性数据库和平台而备受掣肘。因此,建立本土化的农药环境与毒性数据库和数据应用平台成为我国环境污染物研究的当务之急<sup>[2]</sup>。本文通过介绍国内外农药相关数据库的现状,描述常用数据库的基本情况、数据类型、种类及其特点,供相关研究参考与使用。

## 1 国外主要农药相关数据库简介

国外的土壤环境污染物数据库的建立工作发展较早,也较完善。欧美国家早在20世纪就已经具备了完善系统的毒性数据库及完善的数据收集和质量检查规范,例如欧洲食品安全局(European Food Safety Authority, EFSA) OpenFoodTox数据库、美国环境保护局(Environmental Protection Agency, EPA) CompTox Chemicals Dashboard数据库、农药特性数据库(Pesticide Properties Database, PPDB)等数据库。国外毒性数据库主要由国家政府机构及相关科研单位或公司支持和建设,由专业的相关部门管理和维护,定期进行数据更新。多数毒性数据库支持面向公众开放,完全或部分共享。

### 1.1 EFSA OpenFoodTox数据库

EFSA于2002年成立,独立于欧洲立法和行政机构(委员会、理事会、议会)以及欧盟成员国运作,是欧盟食品和饲料安全的独立风险评估机构。该机构旨在评估整个食物链的风险,保护消费者、动物和环境免受与食品相关的风险,为管理欧洲食品安全的决策

者提供独立的科学建议<sup>[3]</sup>。

OpenFoodTox可提供有关食品和饲料中化学危害的开放数据源,农药风险评估相关数据是这个数据库的重要内容。其研究者已经对2 040多个科学观点、声明和结论中的近5 000种物质进行了风险评估。对于每种物质,EFSA都从人类健康、动物健康和生态危害评估方面进行了总结。其中:物质表征部分包含物质的分子式、化学文摘社(Chemical Abstracts Service, CAS)号等数据;参考点部分包含实验类型、物种、作用方式、效果、毒性等数据;参考值部分包含物质评定、特殊类群、参考值等数据;OpenFoodTox部分包含化学评价、遗传毒性、终点研究等数据;EFSA输出部分包含物质的法律依据、输出类型等数据;基因毒性部分包括物质的基因毒性、作者及发布年份数据。

该数据库建立的目的是从EFSA研究人员的报告中提取、汇总数据,因此其数据来源全部为EFSA报告(科学意见、声明、农药评审结论),属于二次摘录的数据库,可通过数据库直接快速地查找原始数据文献。除农药数据以外,此数据库还包括食品添加剂、营养物、食物链中的污染物数据等。数据库的终点部分报告了关键研究,科研人员可从该参考研究中获得参考值。在输入数据时,数据库会自动验证数据质量,而且需要手动修订要提交的数据以保证数据正确无误<sup>[4]</sup>。EFSA拥有科学委员会和专家小组分析其发布的相关数据,有审计员审核,保证数据的可信度,同时承诺公开透明其全部工作。EFSA OpenFoodTox数据库网址为<https://www.efsa.europa.eu/en/data/chemical-hazards-data>,可免费浏览和使用。

### 1.2 EPA CompTox Chemicals Dashboard数据库

EPA成立于1970年12月2日。其中,分布式结构数据库于2004年公开发布,目前收录了超过875 000种物质,主要内容为EPA环境研究人员的研究<sup>[5]</sup>,2014年后依次自动加载了3个公共数据集经过筛选后的部分:EPA的物质注册服务(substance registration service, SRS)、美国国家医学图书馆的ChemID和PubChem。起初可搜索毒性数据库(Distributed Structure-Searchable Toxicity, DSSTox)中仅有7 000多种化学物质的信息且均为手动录入,到2013年扩充到24 000种物质,手动管理与维护已经无法支撑进一步发展。DSSTox\_V2随之诞生,第二代不仅将第一代DSSTox的数据全部数字化,并且加载扩展了多个公共化学数据库,使得DSSTox\_V2拥有超过740 000种化学品的相关数

据。2016年EPA在DSSTox\_V2的基础上发布CompTox Chemicals Dashboard, 是供公众访问DSSTox的化学物质结构数据库和索引列表的主要工具<sup>[6]</sup>。

EPA还拥有其他农药和毒理学相关的数据库, 包括农药化学品搜索(Pesticide Chemical Search)、ChemView、综合风险信息系统、水质门户网站、国家农药信息检索系统等多个数据库。EPA主页上可以检索到有毒物质和疾病管理局的毒理学概况, 大概有275种物质的毒理学报告, 数据内容包括物质的基本信息、理化性质、人体健康数据指标及法律法规等。其主页网址是<https://www.epa.gov/>, 针对农药风险评估的网址是<https://www.epa.gov/pesticide-science-and-assessing-pesticide-risks>, 介绍了大量农药风险评估、农药数据库、农药科学等内容。EPA CompTox Chemicals Dashboard的网址是<https://comptox.epa.gov/dashboard>, 可免费浏览使用。

### 1.3 PPDB

2007年, PPDB作为一个免费访问网站推出。它由赫特福德大学农药与环境研究所为各种终端用户开发, 从随附于农业环境管理软件的数据库演变而来, 并得到了系统的进一步开发, 在欧盟资助的FOOTPRINT项目支持和所获收入的帮助下进行了扩展, 支持风险评估和风险管理。

PPDB是提供农药化学特性、物理化学、人类健康和生态毒理学数据的综合信息数据库。截至2017年, PPDB拥有近2300种农药活性物质和700多种代谢物的数据。每种物质大约存储300个参数, 涵盖化学结果、一般状况、农药配方、环境趋势、生态毒理学、人体健康和保护6方面的内容<sup>[7]</sup>。PPDB的数据从全球出版的科学文献和数据库、手册、注册数据库、公司技术数据表和研究项目中获取。这些数据在输入数据库之前必须经过质量控制, 使用的方法有同行评审以及与其他数据库和数据源交叉检查。如果数据存在疑问且已知原始参考来源, PPDB会重新访问原始来源, 并调整其质量得分, 供使用者参考。其所含农药种类包括已批准使用的农药、新研发的农药及过时或禁用的农药。除农药特性数据库外, 它还有两个关于生物农药和兽药的数据库。其网站是<http://sitem.herts.ac.uk/aeru/ppdb/en/index.htm>, 可免费浏览。

### 1.4 农药行动网络(Pesticide Action Network, PAN)

PAN农药数据库是关于农药毒性和法规信息的一站式站点, 成立于1982年。PAN是由90多个国家

的600多个非政府组织、机构和个人组成的网络, 有五个独立的合作区域中心来实施其项目和活动, 分别是非洲中心、北美中心、拉丁美洲中心、欧洲中心和亚太中心。PAN农药数据库由北美中心负责维护和更新, 汇集不同来源的农药信息, 提供约6400种农药及其转化产物的数据信息, 其数据内容包括识别信息、健康毒性(慢性和急性)、中毒症状、监管、水污染潜力、生态毒性、法规信息等。它是北美注册使用农药数据信息最为完整的数据库。为了确保其数据准确性, 数据均经过科学家的同行评审, 大部分数据来自经证据权重评估的官方信息。

所有数据源均有引用来源, 方便用户非常快速地获取原始数据集。每种数据都有参考文档表明数据来源, 并且说明每种来源的准确性、时效性和全面性。PAN的数据主要来源于官方机构, 如美国EPA、世界卫生组织、国家毒理学计划、美国国立卫生研究院、国际癌症研究机构。如果数据从互联网上获得, 则也有指向原始数据源的链接, 当数据无法从权威数据库获取时, 则提供原始数据来源, 即经过同行专家评议过的科学文献。其网站是<http://www.pesticideinfo.org/>, 可免费浏览。

### 1.5 美国生态毒理数据库(Ecotoxicology Database, ECOTOX)

ECOTOX由EPA研究与发展办公室的国家健康与环境影响研究实验室中部大陆生态分区部门开发和维护, 其数据主要是某一种化学物质对水生生物、陆生生物的生态毒性数据, 由ECOTOX的工作人员从美国EPA中部大陆生态分区图书馆馆藏文献中搜集。

ECOTOX主要由AQUIRE、PHYTOTOX和TERRETOX 3个独立数据库整合而成, 收录了由1970年至今已发表文献中水生和陆生生物毒性数据。截至2020年2月8日, 该数据库中共包含11822种化学物质信息, 涵盖13039种物种。该数据库约每三个月更新一次<sup>[2]</sup>。数据内容包括化学污染物基本信息如英文名称、化学名称、溶剂名称、CAS号、分子式、纯度值等; 实验生物参数如受试生物的名称、拉丁名称、数量、生活龄期及其特征描述等数据; 实验条件信息包括实验类型、实验毒物浓度或剂量、实验位置、染毒方式、实验持续时间等信息; 毒性参数包括半数致死剂量(LD<sub>50</sub>)、致死中浓度(LC<sub>50</sub>)、残留毒性的效应和终点数据等。数据质量检查分为两方面, 分别是收集人员自我检查以及有经验的数据收集人员检查和数据管理员终



检。该数据库的网址为 <https://cfpub.epa.gov/ecotox/search.cfm>，可免费浏览使用。

1.6 毒理学数据网络 (TOXicology data NETwork, TOXNET)

TOXNET 是一组数据库的总称，它由美国国家医学图书馆专业信息服务部建成，包含毒理学文献在线、发育和生殖毒理学数据库 2 个文献性数据库，以及化学致癌研究信息系统、致癌效力数据库、比较毒物基因组学数据库、遗传学数据库、有害物质数据库、综合风险信息系统、国际毒性风险评估等 12 个数据库。目前，有害物质数据库中涵盖 5 000 多种经过专家评审的危险化学品毒理学数据，而毒药学文献在线数据库中有 400 万条参考药物和其他化学品的生物化学、药理学、生理学和毒理学影响数据，其余数据库也均有专业且翔实的信息，其数据量可在网站每个数据库链接下找到。其数据的主要内容包含化学物质的基本信息；健康毒性如致癌性、诱变性、肿瘤增生及抑制性、健康危险评估数据等；环境数据如安全管理、生态毒理数据；以及药物与化学药品的检测数据和其生物化学、药理学、生理学、毒理学相关的知识及数据<sup>[8]</sup>。其数据均来自核心权威图书、政府公文、EPA 技术报告及主流期刊。使用者可选择检索单个、若干个或所有数据库<sup>[9]</sup>。

TOXNET 系列数据库的网址为 <https://toxnet.nlm.nih.gov/>，所有内容均可免费获得。但因美国国家医学图书馆重组，其中大多数毒理学信息服务已集成到其他产品和服务中。其中有害物质数据库、化学致癌研究信息系统、遗传学数据库汇入 PubChem，毒理学文献在线、发育和生殖毒理学数据库 2 个文献性数据库汇入 PubMed，综合风险信息系统、致癌效力数据库、比较毒物基因组学数据库已不在 TOXNET 支持服务内，但仍然可以访问其数据，上文中 TOXNET 网址指明了这几个数据库的访问链接。

1.7 国外主要数据库比较

1.7.1 查询数据比较 EFSA 和 EPA 的数据库以查询评估报告或其他文献资料的形式进行数据检索，数据涵盖基本信息 (CAS 号、分子式、相对分子质量等)、理化性质 (物质状态、熔点、沸点、分解温度、饱和蒸气压、亨利常数、水溶解度、有机溶剂溶解度等)、环境行为 (降解速率、吸附系数、水解速率、光解速率等)、健康毒性 (每日允许摄入量、急性参考剂量、操作者允许接受水平等)、生态毒理等方面，比较详细。PPDB 和 PAN 数据库可直接查询数据，数据指标较前者少。ECOTOX 为生态毒理数据库，提供鸟类、哺乳动物、鱼类、水生无脊椎动物、底栖生物、藻类、水生高等植物、水生微宇宙和中宇宙实验、蜜蜂、其他节肢动物、蚯蚓、弹尾目、其他单个物种等多种较详细的生态毒理数据。详细对比见表 1。

表 1 国外主要农药相关数据库包含的数据指标对比

Table 1 Comparison of selected data indexes included in major foreign pesticide-related databases

| 项目   | EFSA OpenFoodTox                                                              | EPA CompTox Chemicals Dashboard         | PPDB                                                                   | PAN                           | TOXNET                                                                | ECOTOX                                                                |
|------|-------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| 基本信息 | 英文名称、其他名称 (化学名称)、CAS 号、分子式、相对分子质量                                             | 英文名称、其他名称 (化学名称)、CAS 号、分子式、相对分子质量       | 英文名称、其他名称 (化学名称)、CAS 号、分子式、相对分子质量                                      | 英文名称、其他名称 (化学名称)、CAS 号、相对分子质量 | 英文名称、其他名称 (化学名称)、CAS 号、分子式、相对分子质量                                     | 英文名称、CAS 号、化学物质纯度、CAS 号、分子式、相对分子质量                                    |
| 理化性质 | 物质状态、熔点、沸点、分解温度、饱和蒸气压、亨利常数、水溶解度、有机溶剂溶解度、表面张力、辛醇/水分配系数、解离常数、可燃性 (闪点)、爆炸性、氧化性   | 物质状态、熔点、饱和蒸气压、水溶解度、有机溶剂溶解度、辛醇/水分配系数     | 密度、熔点、沸点、分解温度、饱和蒸气压、亨利常数、水溶解度、有机溶剂溶解度、表面张力、辛醇/水分配系数、解离常数、可燃性 (闪点)      | 土壤中的降解速率、吸附系数、水解速率            | 物质状态、熔点、饱和蒸气压、亨利常数、水溶解度、辛醇/水分配系数、解离常数、                                | —                                                                     |
| 环境行为 | 土壤中的降解速率、吸附系数、水解速率、光解速率、生物富集系数                                                | 土壤中的降解速率、水解速率、光解速率                      | 土壤中的降解速率、吸附系数、水解速率、光解速率、生物富集系数、在植物基质上的降解率                              | 水生急性和慢性毒性                     | 土壤中的降解速率、吸附系数、水解速率、光解速率、生物富集系数                                        | —                                                                     |
| 健康毒性 | 急性毒性、短期毒性、基因毒性、长期毒性、致癌性、生殖毒性、发育毒性、神经毒性、ADI、ARfD、AOEL                          | 急性毒性、慢性毒性、短期毒性、长期毒性、致癌性、急性参考剂量、慢性参考剂量   | 急性毒性、ADI、ARfD、AOEL                                                     | 急性毒性、致癌性、生殖毒性、发育毒性            | 急性毒性                                                                  | —                                                                     |
| 生态毒理 | 鸟类、哺乳动物、鱼类、水生无脊椎动物、底栖生物、藻类、水生高等植物、水生微宇宙和中宇宙实验、蜜蜂、其他节肢动物、蚯蚓、弹尾目、氮矿化、碳矿化、其他单个物种 | 鸟类、哺乳动物、鱼类、水生无脊椎动物、底栖生物、藻类、水生高等植物、蜜蜂、蚯蚓 | 鸟类、哺乳动物、鱼类、水生无脊椎动物、底栖生物、藻类、水生高等植物、水生微宇宙和中宇宙实验、蜜蜂、其他节肢动物、蚯蚓、弹尾目、氮矿化、碳矿化 | 鸟类、哺乳动物、鱼类、水生无脊椎动物、底栖生物、藻类    | 鸟类、哺乳动物、鱼类、水生无脊椎动物、底栖生物、藻类、水生高等植物、水生微宇宙和中宇宙实验、蜜蜂、其他节肢动物、蚯蚓、弹尾目、其他单个物种 | 鸟类、哺乳动物、鱼类、水生无脊椎动物、底栖生物、藻类、水生高等植物、水生微宇宙和中宇宙实验、蜜蜂、其他节肢动物、蚯蚓、弹尾目、其他单个物种 |

[注] 上表所列各库提供的指标并非适用于所有农药，仅为综合部分文献所得。ADI：每日允许摄入量；ARfD：急性参考剂量；AOEL：操作者允许接受水平。

**1.7.2 优缺点比较** EFSA 的数据相对完善, 数据较多, 但数据的查找比较烦琐, 且仅收录欧盟的数据。EPA 的数据类型及种类同样较全, 同时还另将农药数据库独立出来, 更有利于搜集查询。PPDB 和 PAN 是纯农药数据库, 其数据类型及指标针对性更强, 对于获取农药数据更加方便且专业。ECOTOX 数据库的数据资料

多源于文献, 且不需要阅读文献, 直接以表格的方式呈现数据, 还可以直接导出为 Excel 文件, 方便使用者统计; 但导出数据在使用时还需要进行核实和筛选。TOXNET 数据库内容多侧重于药物且缺少生态毒理方面的数据。详细对比见表 2。

表 2 国外主要农药相关数据库优缺点比较

Table 2 Comparison of advantages and disadvantages of major foreign pesticide-related databases

| 数据库名称                           | 创建机构           | 网址                                                                                                                              | 优点                              | 缺点                                 |
|---------------------------------|----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------|------------------------------------|
| EFSA OpenFoodTox                | 欧洲食品安全局        | <a href="https://www.efsa.europa.eu/en/data/chemical-hazards-data">https://www.efsa.europa.eu/en/data/chemical-hazards-data</a> | 提供较为详细、完整的数据                    | 以文献形式搜索, 数据显示不直观, 仅有欧洲的数据          |
| EPA CompTox Chemicals Dashboard | 美国环境保护局        | <a href="https://comptox.epa.gov/dashboard">https://comptox.epa.gov/dashboard</a>                                               | 提供较为详细、完整的数据, 有独立的农药数据库         | 以文献形式搜索, 数据显示不直观, 操作烦琐             |
| PPDB                            | 赫特福德大学农药与环境研究所 | <a href="http://sitem.herts.ac.uk/aeru/ppdb/en/index.htm">http://sitem.herts.ac.uk/aeru/ppdb/en/index.htm</a>                   | 数据直观, 查找方便                      | 数据来源不易知晓, 数据较少, 缺失较多               |
| PAN                             | 多国非政府组织机构共同成立  | <a href="http://www.pesticideinfo.org/">http://www.pesticideinfo.org/</a>                                                       | 提供了按生物类别和物种分类的毒性排名              | 缺少详细的生态毒理数据                        |
| ECOTOX                          | 美国国家环境保护局      | <a href="https://cfpub.epa.gov/ecotox/search.cfm">https://cfpub.epa.gov/ecotox/search.cfm</a>                                   | 提供大量较为详细的陆生和水生毒理学信息, 且有明确的数据来源  | 数据量太大, 使用时需要人工筛选, 而且数据有可能会出错, 需要核查 |
| TOXNET                          | 美国国家医学图书馆      | <a href="https://toxnet.nlm.nih.gov/">https://toxnet.nlm.nih.gov/</a>                                                           | 提供的数据经过严格核查, 收录数据内容较广, 且不断扩充及更新 | 现已整合至其他 NLM 服务当中, 需分数据库搜索          |

**1.7.3 在环境管理应用中的比较** 对于环境管理研究, 优先推荐 EFSA OpenFoodTox、EPA CompTox Chemicals Dashboard、PPDB 和 ECOTOX 数据库。EFSA OpenFoodTox 和 EPA CompTox Chemicals Dashboard 数据类型丰富, 基本涵盖了环境管理研究所需, 包含欧洲和美国田野实验和实验室的原始数据。但若无法有效检索到相关数据, 则可以使用 PPDB 快速获得化学物质的基本信息、理化性质、环境行为、健康毒性的数据, 再结合 ECOTOX 大量的生态毒理数据, 就可以补全研究所需信息。不建议使用 PAN 和 TOXNET 数据库。PAN 数据库数据量和数据类型较少, 难以满足研究所需, 可使用 PPDB 代替; TOXNET 数据库现已整合到其他美国国家医学图书馆服务当中, 需要单独进入下属数据库进行检索, 操作较为烦琐。

2 国内农药相关数据库简介

2.1 国内农药相关数据库建设现状

自 1978 年起, 我国开始建立农药数据库, 包括中国国家有毒化学品基础数据库、中国科学院化学物质毒性数据库、上海有机所化学专业数据库等。这些数据库的主要内容为物质的基本信息、理化性质数据、健康毒性数据、来源文献、职业标准和相关法规等信息。

**2.1.1 中国国家有毒化学品基础数据库** 中国国家有毒化学品基础数据库由环境科学研究院于 1990 年建

成, 包含 11 个子库。数据主要来源于 1985 年“全国化学品调查登记”所收集的万种化学品的档案材料、国外的化学物质毒性数据库 (Registry of Toxic Effects of Chemical Substances, RTECS) 和国际潜在有毒化学品登记中心数据库, 现不能在網上公开使用<sup>[10]</sup>。

**2.1.2 化学物质毒性数据库** 化学物质毒性数据库由中国科学院过程研究所发布, 由中国科学院计算机网络信息中心承担建设, 是综合科技信息数据库的重要组成部分。该数据库分为三部分: 化学物质毒性英文数据库、化学物质毒性中文文献数据库、化学品安全特性数据库。

化学物质毒性英文数据库数据大部分来自 2001 年前公开发行的 RTECS。在 2001 年之前 RTECS 是美国国家职业安全卫生研究所免费提供的出版物, 但现在 RTECS 属于硅谷高科技公司 Symyx Technologies, 并且必须订阅付费才能获取数据。化学物质毒性英文数据库的数据从 20 世纪 50 年代开始积累, 每年四次更新。至 2003 年, 英文数据库总数据量约 300 MB, 含 150 000 多个记录, 包括刺激性、毒性、致畸、致癌与生殖效应等健康毒性数据, 以及生态环境标准与职业卫生标准、EPA 文件数据等, 也涵盖了关于化学品安全管理、预防化学事故和灾害应急响应中需要的物理 (易燃性、易爆性)、化学 (毒性、环境标准) 的特性数据, 基本满足职业卫生、公共卫生以及环境研究等工

作需要。

化学物质毒性中文文献数据库编辑整理了约120多种自1953年至今国内公开定期出版的期刊论文中的实验、观测等产生的特性数据,并由专家负责对数据进行审核与校正,按照一定的数据规格录入化学物质毒性中文文献数据库。化学物质毒性中文文献数据库的数据收录工作自2003年启动,截至目前已建成数据量约5.6MB,含3300余条记录。

化学品安全特性数据库,其数据内容主要是常见化学物质的物理安全特性(易燃性、易爆性、储运条件)、化学安全特性(毒性、环境标准)等实质性数据;并且收录了如CAS号、化学名、商品名、相对分子质量和分子式等基本信息。目前含有约5MB、7300多条记录,由中国科学院自主开发。其网址为<http://www.toxic.csdb.cn/>,向注册用户免费开放。

**2.1.3 化学专业数据库** 化学专业数据库隶属于中国科学院信息化专项科学大数据工程项目,由中科院上海有机化学研究所承担建设。此数据库现已成为国内最大的公益性化学数据库,部分数据来自RTECS,下文介绍化学专业数据库中的两个子库<sup>[11]</sup>。

毒药物动力学预测数据库是上海有机化学研究所化学专业数据库系统的一部分,收录常见药物研发所需的大量毒药物动力学预测数据和毒性估测数据。总共包括10万多种常见的天然化合物和药用化合物。

用户可通过输入化合物结构来检索数据库中的物质,或通过设定预测数据的种类和数值范围,筛选出目标化合物。网址为[http://www.organchem.csdb.cn/scdb/main/ADME\\_introduce.asp](http://www.organchem.csdb.cn/scdb/main/ADME_introduce.asp),使用前需注册账户。

上海有机化学研究所环境化学毒物防治数据库目前收录了1000余种环境有害化学毒物的防治技术资料,包含化学毒物的稳定性、毒理学资料、中毒临床、生态危害与环境保护、安全生产与劳动保护、流行病学调查、理化特性等内容。用户可通过化学品的中英文名称、CAS号、分子式、毒物类型等检索化学品并查看其毒性防治信息。网址为[http://www.organchem.csdb.cn/scdb/main/huanjing\\_introduce.asp](http://www.organchem.csdb.cn/scdb/main/huanjing_introduce.asp),使用前需注册账户。

**2.1.4 农兽药数据库** 由烟台富美特食品科技有限公司旗下食品行业综合性门户网站——食品伙伴网开设的农兽药数据库,数据更新至2012年,共计3500余种农、兽药数据条目。数据包含农兽药的基本信息、理化性质、毒理学、应用情况等。其网址为<http://db.foodmate.net/pesticide/>,可免费浏览。

**2.1.5 国内数据库比较** 中国国家有毒化学品基础研究库有较好的数据权威性,但不能在互联网上访问;化学物质毒性数据库生态毒理数据较少;化学专业数据库无专门的农药数据库;农兽药数据库数据来源较不明确。详见表3。

表3 国内主要农药相关数据库优缺点比较

Table 3 Comparison of advantages and disadvantages of major domestic pesticide-related databases

| 数据库名称          | 创建机构         | 网址                                                                                | 优点             | 缺点            |
|----------------|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------|----------------|---------------|
| 中国国家有毒化学品基础数据库 | 环境科学研究院      | 无,不能在互联网上访问                                                                       | 有较好的权威性,数据来源可靠 | 不能在互联网上访问     |
| 化学物质毒性数据库      | 中国科学院过程研究所   | <a href="http://www.toxic.csdb.cn/">http://www.toxic.csdb.cn/</a>                 | 提供较为详细、完整的数据   | 生态毒理数据较少      |
| 化学专业数据库        | 中科院上海有机化学研究所 | <a href="http://www.organchem.csdb.cn/">http://www.organchem.csdb.cn/</a>         | 数据种类丰富、数量较多    | 分类较多,无农药专用数据库 |
| 农兽药数据库         | 食品伙伴网        | <a href="http://db.foodmate.net/pesticide/">http://db.foodmate.net/pesticide/</a> | 数据查询方便         | 缺少精确的数据来源     |

## 2.2 国内农药相关数据库建设的局限性

目前中国本土农药相关数据库中的数据仍不够全面,从上文列举的四个数据库可以看出:

(1) 我国本土毒性数据较为缺乏。国内数据库中中国本土生物的健康毒性数据比国外少,且缺乏大量生态毒理数据。以化学物质毒性数据库为例,英文文献有150000多条记录,且来自外国数据库,而国内数据为3300余条。

(2) 数据收集内容较少。我国本土数据库的数据主要包括物质基本性质、少数环境行为数据、健康毒性、来源文献等,其中健康毒性数据包含急性毒性、

每日允许摄入量、急性参考剂量、操作者允许接受水平、测试方法、暴露途径等,生态毒性方面包括测试物种的模糊名称(俗名)、毒性物质用量、暴露时间、毒性作用描述等信息。对比美国ECOTOX数据库,除包含上述国内化学物质毒性数据库中的数据类型外,其数据详细到物种分类学名,物种种类也更加丰富,物种会注明龄期,标明实验条件以及毒性实验相关参数等方面关键的毒性信息,相较于国内数据库更加详细完善。

(3) 数据更新维护不及时。国内的化学英文数据库大部分数据来自美国的RTECS,并且是2001年之前



的公开版本,没有进行及时更新,农兽药数据库仅更新至2012年的数据。

(4) 数据共享不足。国内数据库存在不提供免费查询和浏览功能,需要单独注册,部分使用受限,不对外开放且普适性较差的问题。

(5) 尚未建立数据收集规范、数据筛选标准。我国本土数据库目前尚未建立毒性数据的收集和整编规范,缺乏严格的数据筛选标准,因此无法保证数据的准确性、可靠性,也可能会影响评价结果。

(6) 缺乏专门的农药数据库。我国的数据库多为化学物质数据库,包含物质更多,但农药科学相关的生态毒理、健康毒性等数据不够完善。而国外有PAN和PPDB等农药数据库,更加方便农药环境相关研究的开展。

### 3 小结

虽然我国过去已经开展了大量的农药科学与环境基准方面的研究,也积累了相对丰富的文献数据资料,但由于数据的收集、整理、编纂和实地获取极其耗时耗力,同时国内缺少相应的国家标准技术规范为数据收集过程与整理提供支持,导致国内相关数据库建设工作极少,这些已成为我国生态环境研究发展的关键障碍<sup>[12]</sup>。

国外数据库数据来源广泛,数据内容相对于我国数据库更加丰富准确,以及数据更新及时且完全共享等特性导致目前我国在开展农药环境研究时有关毒性的大部分数据来源于国外数据库。而在国外数据库中,大部分是基于外国主要生物体系的数据,中国本土的农药毒性数据较少。大量采用国外的有关数据开展相关研究,常常会因为地域间物种差异<sup>[13]</sup>、区域间污染物背景浓度和基本性质不同<sup>[14]</sup>、人体污染物暴露途径和数量不同等原因而造成误差,降低了相关研究的准确度与可信度,使得有关研究的开展,农药污染的监测、治理、防控受到影响。除此之外,由国外数据库中所得到的数据多为急性毒理数据,但针对农药的慢性中毒等方面的研究,同样需要建立我国的农药慢性毒性数据库,对各种农药的慢性毒性进行长期连续的监测。

### 4 展望

我国虽然目前没有相对完善系统的农药毒性数据库,但国外相关数据库可以给我们许多启示。综合

国外经验,我国的农药毒性数据库建设迫切需要在以下几方面有所突破:

(1) 建立农药数据整编标准和规范。目前我国农药相关数据库缺少毒性数据的整编标准和规范。建立系统的标准和完善的数据收集流程可以充分保证数据库建设的工作质量,减少没有意义的重复性任务,提高数据收集的工作效率。我国可以借鉴ECOTOX数据库的数据收集规范,其数据收集规范、数据质量保证和检查程序由过去30年数据生产过程中总结而成,我国可以在开展农药数据库建设中学习期经验,来补足我国在数据整编技术方面与收集流程方面的不足<sup>[2]</sup>。

(2) 建立信息完整、丰富、有效和共享的农药数据库。农药数据应包括基础信息(中英文名称、化学名称、CAS号、分子式、相对分子质量)、理化性质(物质状态、熔点、沸点、分解温度、饱和蒸气压、亨利常数、水溶解度、有机溶剂溶解度、表面张力、辛醇/水分配系数、解离常数、可燃性(闪点)、爆炸性、氧化性)、环境行为(土壤中的降解速率、吸附系数、水解速率、光解速率、生物富集系数)、健康毒性(急性毒性、短期毒性、基因毒性、长期毒性、致癌性、生殖毒性、发育毒性、神经毒性、每日允许摄入量、急性参考剂量、操作者允许接受水平)、生态毒理(物种信息、实验条件、实验结果信息等)。数据来源既可以学习EFSA OpenFoodTox和EPA CompTox Chemicals Dashboard从研究文献中提取原始数据,方便数据溯源;也可以学习ECOTOX和TOXNET将多个有关的毒性数据库汇集编纂成完整的数据库,供不同的科研需求人员使用。

(3) 注重收集中国本土生物毒性数据。中国的农药毒理研究仍需要科技更加先进国家的农药毒性数据库提供支持。虽然我国已经开展了一定量的本土生物毒理学实验,但目前积累的健康毒性和生态毒理数据仍然不够充足,无法有效保护我国本土生物与生态环境<sup>[15]</sup>。国内生物区系毒理数据的积累和完善是为符合中国国情的基准研究提供支持的关键问题之一。因此,应注重优先收集涉及本土生物的毒理数据,如国内外数据库、报告、项目中包含中国本土生物的毒性数据资源。

尽管我国尚未建立完备的农药基础毒性数据库和平台,但伴随着国内农药毒性数据库初步建立完成、信息化时代的到来以及国内的科研力量不断发展

壮大,中国本土的农药毒理数据库也一定能够进一步发展,渐趋完善。在此过程中,应该充分借鉴国外数据库的运行经验,收集完善各项中国本土的农药毒性数据,并促进各个平台间的信息交流及对外开放,为农药污染物测量监督管理等方面的科研需求提供强有力的支持。

## 参考文献

- [1] 莫欣莹. 中国农药安全规制体制与影响 [D]. 大连: 东北财经大学, 2018.
- [2] 吴爱明, 赵晓丽, 冯宇, 等. 美国生态毒理数据库 (ECOTOX) 对中国数据库构建的启示 [J]. 环境科学研究, 2017, 30 (4): 636-644.
- [3] S-IN, Soluzioni Informatiche. Further development and update of EFSA's Chemical Hazards Database (NP/EFSA/EMRISK/2012/01) [J]. EFSA Support Publications, 2014, 11 (9): 654E.
- [4] DORNE J L, RICHARDSON J, KASS G, et al. Editorial: OpenFoodTox: EFSA's open source toxicological database on chemical hazards in food and feed [J]. EFSA J, 2017, 15 (1): e15011.
- [5] JUDSON R S, MARTIN M T, EGEGHY P, et al. Aggregating data for computational toxicology applications: The U. S. Aggregating data for computational toxicology applications: The U.S. Environmental Protection Agency (EPA) Aggregated Computational Toxicology Resource (ACToR) system [J]. Int J Mol Sci, 2012, 13 (2): 1805-1831.
- [6] GRULKE C M, WILLIAMS A J, THILLANADARAJAH I, et al. EPA's DSSTox database: history of development of a curated chemistry resource supporting computational toxicology research [J]. Comput Toxicol, 2019, 12: 100096.
- [7] LEWIS K A, TZILIVAKIS J, WARNER D J, et al. An international database for pesticide risk assessments and management [J]. Hum Ecol Risk Assess, 2016, 22 (4): 1050-1064.
- [8] 佟岩, 陈丰, 毕玉侠. TOXNET 毒理学网络数据库特色及应用 [J]. 药学教育, 2003, 19 (2): 63-64.
- [9] 万晓霞. TOXNET 毒理学数据库的检索与应用 [J]. 医学信息学杂志, 2009, 30 (6): 27-30.
- [10] 吴爱明. 我国水质基准数据整编技术方法初步研究 [D]. 昆明: 昆明理工大学, 2017.
- [11] 徐挺军, 陈维明. 化学专业数据库知识产权保护的探索 [J]. 科研信息化技术与应用, 2018, 9 (2): 11-16.
- [12] 赵晓丽, 赵天慧, 李会仙, 等. 中国环境基准研究重点方向探讨 [J]. 生态毒理学报, 2015, 10 (1): 18-30.
- [13] 张思锋, 刘晗梦. 生态风险评价方法述评 [J]. 生态学报, 2010, 30 (10): 2735-2744.
- [14] HU X, SHI W, WEI S, et al. Occurrence and potential causes of androgenic activities in source and drinking water in China [J]. Environ Sci Technol, 2013, 47 (18): 10591-10600.
- [15] JIN X, WANG Y, GIESY J P, et al. Development of aquatic life criteria in China: viewpoint on the challenge [J]. Environ Sci Pollut Res Int, 2014, 21 (1): 61-66.

(英文编辑: 汪源; 责任编辑: 汪源)