

2022年12月11日 星期日 用户名: 密码: 验证码: 

登录

注册

找回密码

设为首页

中文 | English



新闻

生命科学 | 医学科学 | 化学科学 | 工程材料 | 信息科学 | 地球科学 | 数理科学 | 管理综合

站内规定 | 手机版

首页 | 新闻 | 博客 | 院士 | 人才 | 会议 | 基金·项目 | 大学 | 论文 | 视频·直播 | 小柯机器人 | 专题

本站搜索

作者: 陈景文 来源: 中国科学报 发布时间: 2022-6-8

选择字号: 小 中 大

计算毒理学不应成为“卡脖子”学科

■ 陈景文

日前,国务院发布了《新污染物治理行动方案》。该方案要求严格源头管控,防范新污染物产生,切实保障生态环境安全和人民健康,构建化学物质计算毒理与暴露预测平台。这些都凸显了环境计算毒理学在新污染物治理中的重要性。

环境计算毒理学是一门基于数学和计算机模型,采用分子生物学与化学等手段,揭示化学物质环境暴露、危害性与风险性之间定性和定量关系的学科,也是化学物质环境大数据与机器学习、数据驱动与知识驱动建模的交叉研究领域。

计算毒理学学科需求的产生

计算毒理学技术之所以能成为源头防范新污染物产生的基础科学工具,与新污染物种类多样、无组织排放而来源广泛、毒性和环境危害性多样、污染隐蔽等特点有关。

有毒有害化学物质尤其是合成化学品的生产和使用,是新污染物的主要来源。据统计,目前市场上使用的化学品有30多万种。人类生活质量的改善、经济社会的发展,都需要化学品发挥其必要作用。

然而,如果化学品不能被严格管理,会影响人类、生态健康以及可持续发展。有研究表明,人类70%~90%的疾病与化学物质的污染有关。人类生殖发育相关疾病的发生、癌症发病率和死亡率的增加、自

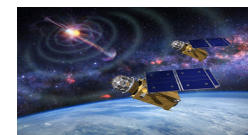


相关新闻

相关论文

- 1 教育考试院回应高考泄题相关举报:已向警方报案
- 2 国家药监局:对新冠检测试剂实行“最严监管”
- 3 “控温外衣”“智能管理员”……科技护航神十四
- 4 高考甲卷难 专家:难易度不影响录取与公平
- 5 世界首幅1:250万月球全月地质图完成
- 6 世界前50院校留学生在沪工作后可直接申办落户
- 7 留学生热议高考:冷静应对人生十字路口的抉择
- 8 数学高考题被泄露?教育部考试院:已接到举报

图片新闻



然生态系统生物多样性的降低等，和有毒有害化学物质不无关系。联合国设定的17个可持续发展目标中，有11个与化学品有关。

因此，在化学品及相关产品生产、储存、运输、使用、废物处置等全生命周期中，对化学品进行健康管理，尽可能地避免化学品成为新污染物，可落实该方案关于严格源头管控、防范新污染物产生的要求。

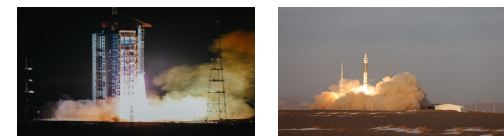
进行化学品的源头防控需要评价化学品的环境释放、分布、转化和危害性（如毒性、消耗臭氧潜能）变化，也就是评价化学品的环境暴露、人体和生物体的内暴露以及毒害效应，进而评价化学品的健康风险和環境风险。对于风险超过管理限值、环境容量或生态环境承载能力的化学品，可通过降低或阻断其环境释放和暴露，或采用毒害效应低的化学品（即替代化学品）降低其危害，从而降低其风险值，实现化学品风险的源头防控。

此外，改进相关产品的设计，在保持必要功能的同时降低产品中化学品含量，改进工艺，降低产品中化学品释放速率等，都是降低或阻断化学品及新污染物环境暴露的措施。

采用环境持久性、生物蓄积性、毒性低的化学品替代原有化学品，是降低危害性（毒性）的有效措施，也可以降低风险。在环境释放速率相同的条件下，环境持久性低的化学品，环境暴露浓度低。生物蓄积性低的化学品，人体和生物体内的内暴露浓度低。这些因素连同毒性的降低，共同导致风险的降低。

当然，一些化学品的环境转化产物，其环境持久性、生物蓄积性和毒性甚至比母体还高；一些化学品的环境转化过程会导致更大的毒害效应。例如，有研究发现，防晒剂中的氧苯酮在珊瑚体内代谢后，会形成具有光敏性质的产物，其具有的光毒性会导致珊瑚死亡，破坏珊瑚礁生态系统。所以，还需要关注化学品环境转化产物的持久性、生物蓄积性和毒性变化。

能否在替代化学品的研发和应用方面占据先机，已经成为化学品生产和进出口企业竞争力和市场占有率高下的关键。所谓替代化学品，就是在保持化学品必要功能的前提下，环境持久性、生物蓄积性和毒性更低的化学品。化学品相关管理技术、标准、规范的先进性和系统性，也已成为发达国家的一种绿色贸易壁垒。

[>>更多](#)

一周新闻排行

- 1 为纺织业发展定制“中国方案”
- 2 世界最大射电天文台开建
- 3 中国首个深海主题综合性临展亮相上海
- 4 吴朝晖任科学技术部副部长
- 5 我国科学家找到调控水稻小麦穗发芽的“开关”
- 6 莫毅明院士：除了刷题，还能怎么学数学？
- 7 黑龙江省新一轮“双一流”建设名单公布
- 8 我国实现相同工艺器件集成度翻倍并获卓越性能
- 9 太空水稻回家了，长这样
- 10 专访宗传明：数学奠定“后量子密码”的基础

编辑部推荐博文

- CrCoNi 合金：在极低温中具有极高的断裂韧性
- OpenAI提供的ChatGPT演示应用体验
- 局域斑块及邻域植物多样性对植食者多样性的影响
- 馋思灰汁团
- 课程思政示范案例评阅感悟
- NIH修改同行评审制度以克服声誉偏见

[更多>>](#)

面对种类众多的化学物质及其在环境中可能的转化产物，如果仅仅基于模拟实验逐一测试环境暴露行为、毒害效应参数来评价其风险，必然面临效率低、通量低、成本高的问题，这已经导致超过10万种既有化学品在经过了环境暴露、危害和风险评价的情况下在市场上使用，其中有些化学品甚至被学者称为“化学定时炸弹”。

传统毒性测试不仅通量低，还要消耗大量的实验动物，有悖以替代、减少和优化为准则的动物实验伦理原则。此外，传统毒性测试还面临测试结果向保护人体健康的毒性外推问题。环境保护的根本目的是保护人体的健康和福祉，促进人类社会的持续发展。

在上述问题的驱动下，伴随毒理学科从以动物实验为主向基于人源细胞的高通量、高内涵测试转变，从以描述性为主向更具机理性、预测性科学方向转变，通过化学、生物学、计算科学、机器学习和大数据分析等方向的交叉，环境计算毒理学顺应时代的需求而生。

新方案发布有助形成后发优势

当下，发达国家非常重视计算毒理学技术的研究和应用。美国环保局在2005年成立了国家计算毒理学中心。欧盟从2007年开始实施化学品注册、评价、核准的管理法规，并成立了专门的研究机构，研究计算毒理学和各种非动物测试技术的应用。经济合作与发展组织也发布了关于计算毒理学和化学品管理的相关导则、模型和数据库。

我国也培育了以大连理工大学、中科院生态环境研究中心、南京大学等单位为代表的环境计算毒理学研究团队，集聚了人才队伍，使得我国在计算毒理学方向总体上达到与发达国家并跑、个别方面领跑的水平。

然而，同美国和欧洲等发达国家及地区比，我国在计算毒理学理论和技术研究方面，总体上缺乏顶层设计和系统设计，缺乏大平台和基础数据库的支撑，缺乏持续性的大科学计划的引领。

而美国2009年实施了化学品毒性评价战略计划，支持信息（大数据）、暴露科学、生物效应筛查、多尺度模型方面的研究，计划连续20年，每年投入1亿美元，以实现计算毒理学应用于化学品风险性筛查和预测的远景目标。

我国首个《新污染物治理行动方案》的发布，使我国在环境计算毒理学理论与技术等方面的进步呼之欲出，有可能形成后发优势，在化学品和新污染物治理的计算毒理学技术体系方面，拥有相应的话语

权、抢占相关技术高地。在这方面，我们一个技术方向也不应掉队，不能被“卡脖子”。

（作者系大连理工大学教授）

《中国科学报》（2022-06-08 第3版 领域）

打印 发E-mail给:

[关于我们](#) | [网站声明](#) | [服务条款](#) | [联系方式](#) | 中国科学报社 京ICP备07017567号-12 京公网安备 11010802032783

Copyright © 2007-2022 中国科学报社 All Rights Reserved

地址：北京市海淀区中关村南一条乙三号

电话：010-62580783