

Od wczesnych lat 60-tych ludzkość wykazuje obawy o potencjalny długoterminowy efekt szkodliwy substancji uznanych za: trwałe w środowisku (ang. *persistent*, „P”), wykazujące wysoki potencjał do bioakumulacji (ang. *bioaccumulative*, „B”) oraz toksyczne (ang. *toxic*, „T”) tzw. związki scharakteryzowane jako PBT. Są to np. pestycydy chloroorganiczne lub wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne. Ocena bioakumulacji jest istotna ze względu na dalekosiężne zagrożenie dla środowiska i zdrowia człowieka czego doskonałym przykładem może być powszechnie znany pestycyd dichlorodifenylotrichloroetan (DDT). Dlatego też ocena potencjału do bioakumulacji jest jednym z kluczowych parametrów w ocenie ryzyka środowiskowego i uwarunkowań prawnych dotyczących ochrony środowiska. Organizmy mogą akumulować substancje chemiczne bezpośrednio z otaczającego je środowiska, co jest nazywane biokoncentracją, lub również z diety co określa się jako biomagnifikację. Jeśli weźmiemy pod uwagę oba procesy to mówimy o bioakumulacji danej substancji w organizmie żywym. Tym samym w zależności od drogi pobierania substancji chemicznej z otaczającego środowiska, ilościową charakterystykę intensywności tego procesu wyraża współczynnik bioakumulacji (ang. *bioaccumulation factor*, BAF) lub współczynnik biokoncentracji (ang. *bioconcentration factor*, BCF). Współczynniki te są stosunkiem ilości związku chemicznego w organizmie do stężenia tego związku w pożywieniu lub otaczającym środowisku.

Odnosząc się do ogólnej definicji, ciecze jonowe (ILs) są solami (są zbudowane z kationów i anionów) o temperaturze topnienia poniżej 100°C. W ostatnich latach ILs zyskały dużą popularność, głównie z powodu interesujących właściwości fizykochemicznych np. niezwykle dużej odporności elektrochemicznej i termicznej, niskiej prężności par, co sprawiło, że znalazły szerokie zastosowanie w wielu dziedzinach jako np.: płyny w kompresji gazów, elektrolity w bateriach, w tym bateriach solarnych, jako środki ochrony roślin czy substancje aktywne farmaceutycznie. Tym samym wzrost ilości stosowanych ILs niesie za sobą niebezpieczeństwo ciągłego uwalniania ich do środowiska wraz z odpadami komunalnymi, jako ścieki procesowe czy przypadkowe wycieki. Ciecze jonowe stały się związkami istotnymi z punktu widzenia ochrony środowiska i są obecnie uznawane za zanieczyszczenia, wymagające szczególnej uwagi.

Ocena bioakumulacji i wyznaczenie współczynnika biokoncentracji lub bioakumulacji (BCF, BAF) metodami eksperymentalnymi jest czasochłonna, kosztowna i z etycznego punktu widzenia nie znajduje zastosowania do rutynowych badań wielu związków chemicznych. Dlatego też często stosowana alternatywą są modele przewidujące potencjał do bioakumulacji na podstawie parametrów fizykochemicznych, które to mogą być wyznaczone w dość prosty sposób, jak np. współczynnik podziału oktanol-woda ($\log K_{ow}$). Modele takie, o ile sprawdzają się dość dobrze w przypadku związków hydrofobowych, to w przypadku związków obdarzonych ładunkiem dostarczają błędnych wniosków. Wynika to z faktu, iż klasyczne modele (oparte na współczynniku $\log K_{ow}$) nie rozważają wystarczająco oddziaływań jonowych pomiędzy organicznymi jonami a biomolekułami odpowiedzialnymi za proces bioakumulacji, a także oddziaływaniami pomiędzy jonami w roztworze co również może wpływać na ten proces.

Głównym celem niniejszego projektu jest zrozumienie i oszacowanie oddziaływań organicznych jonów i w szczególności par jonowych z biomolekułami i skonstruowanie wniosków w odniesieniu do bioakumulacji. Zastosowane metody badawcze będą obejmowały testy *in vitro* i testy *in vivo* dla obszernej grupy ILs, przy czym testy *in vivo* wykorzystujące organizmy żywe, zostaną ograniczone do minimum i zaadoptowane jedynie jako testy potwierdzające wnioski uzyskane w toku eksperymentów *in vitro*. Na podstawie uzyskanych wyników zostanie zaproponowany model ilościowej zależności struktura-aktywność (QSAR) umożliwiający wiarygodne szacowanie potencjału do bioakumulacji różnych związków jonowych.

