

Ciecze jonowe (CJ) to związki chemiczne, które ogólnie rzecz biorąc można sklasyfikować jako sole. W odróżnieniu jednak od soli znanych z życia codziennego (np. sól kuchenna chlorek sodu), są one ciekłe w normalnych warunkach pokojowych. Ta niezwykła cecha jest bezpośrednio i silnie związana z budową chemiczną cząsteczek CJ. W porównaniu do „tradycyjnych” soli zbudowanych z małych i sferycznych jonów, które można efektywnie upakować jeden obok drugiego i w konsekwencji utworzyć ciało stałe, CJ zbudowane są z drobin o wiele większych i cechujących znaczną asymetrią. Taka budowa przeszkadza jonom w tworzeniu regularnych i dobrze upakowanych skupisk cząsteczek, co przekłada się na utworzenie fazy ciekłej. Z powodu swojej nietypowej natury chemicznej, CJ wykazują wiele ciekawych i użytecznych właściwości w porównaniu zarówno z klasycznymi solami nieorganicznymi, jak również z tradycyjnymi rozpuszczalnikami znanymi z chemii organicznej. Te właściwości otwierają możliwości wielu zastosowań w wielu dziedzinach nauki, ale również przemysłu. Szczególnie istotną cechą CJ jest ich nielotność — faktycznie, CJ jako sole praktycznie nie parują. Ta właściwość jest szczególnie istotna z punktu widzenia nowoczesnych, tj. ekologicznych, technologii chemicznych opartych na czystych i „zielonych” procesach i materiałach. Dlatego też, zastąpienie przez CJ lotnych rozpuszczalników organicznych stosowanych w przemyśle, może w niedalekiej przyszłości wpłynąć na znaczącą poprawę ogólnie przyjętego wizerunku chemii i przemysłu chemicznego jako dziedzin życia, które istotnie szkodzą środowisku naturalnemu.

Inną kluczową cechą CJ jest ich ogromna różnorodność. Faktycznie, w chwili obecnej syntezować można niezliczone liczby CJ różniące się między sobą strukturą chemiczną jonów. Należy jednak pamiętać o tym, że badania eksperymentalne (syntezy, pomiary) są na ogół bardzo czasochłonne i drogie. Czynniki czasowy i ekonomiczny hamują zatem w sposób wyraźny dalszy rozwój chemii CJ i rozwiązań technologicznych z ich udziałem. Jest to bardzo niekorzystne również z punktu widzenia badań podstawowych, ponieważ dysponując ogromną liczbą danych na temat CJ, naukowcy oraz inżynierowie mieliby możliwość określania wzajemnych związków pomiędzy strukturą chemiczną i składem CJ a ich najważniejszymi właściwościami. Dysponując z kolei taką wiedzą, mogliby oni projektować CJ spełniające określone wymagania wyznaczone przez konkretne zastosowania.

Współcześnie, takie projektowanie można wykonać wykorzystując zarówno dostęp do szybkich maszyn obliczeniowych (wręcz komputerów osobistych), jak również do osiągnięć chemii matematycznej i chemoinformatyki — względnie nowych dziedzin chemii, korzystających w sposób kolektywny z wielu narzędzi matematyki, statystyki oraz informatyki. W szczególności ogromne zasoby danych („big data”) eksperymentalnych na temat CJ przeprowadzonych i opublikowanych od początku bieżącego stulecia, można przetwarzać stosując nowoczesne techniki obliczeniowe zwane algorytmami uczenia. Celem takich działań może być utworzenie ilościowych związków struktura-właściwość (ang. *quantitative structure-property relationship*, QSPR) dla CJ. Mając dane modele QSPR, pojawia się możliwość wykonywania tzw. eksperymentów „in silico” w celu przeszukiwania ogromnych bibliotek struktur, ale również w celu znalezienia odpowiednich ścieżek prowadzenia rzeczywistych badań eksperymentalnych. Ze względu na złożoność chemiczną CJ, bardzo ważne jest również poznanie, które aspekty ich struktury (rodzaj atomów, topologia, geometria, rozkład ładunku cząsteczek) determinuje ich właściwości w sposób najistotniejszy.

Opracowanie i przetestowanie (włączając w to weryfikację eksperymentalną) serii nowych modeli QSPR dla kilku wybranych istotnych właściwości fizykochemicznych i termodynamicznych (na przykład, temperatura topnienia, gęstość, lepkość, rozpuszczalność w wodzie) jest zasadniczym celem i praktycznym aspektem projektu. Badanie wpływu sposobu przedstawienia struktury chemicznej również stanowi kluczowy element podjętych badań, którego celem jest przede wszystkim podjęcie próby zbliżenia się do zrozumienia właściwości CJ z punktu widzenia ich mikrostruktury, a w konsekwencji przyspieszenie dalszego rozwoju nowych zastosowań CJ w wielu dziedzinach nauk czystych i stosowanych oraz przemysłu.