**РАЗРАБОТКА НА ПРЕСКРИЙНИНГ МОДЕЛ ЗА ОТКРИВАНЕ НА СЪВРЕМЕННИ ОРГАНИЧНИ МАТЕРИАЛИ НА БАЗА ДИРАДИКАЛОВИЯ ИМ ХАРАКТЕР**

**ръководител**: гл. ас. д-р Юлия Романова

*Факултет по химия и фармация*

Множество научни сведения от последното десетилетие доказват, че молекулите с различен от нула дирадикалов характер (DRC) притежават уникални свойства спрямо съединенията със затворена електронна обвивка и представляват атрактивни материали в органичния дял на фотоволтаиката, фотониката и спинтрониката. По наши сведения, до момента оценката на дирадикаловия характер не е използвана при *in silico* подходи за молекулен дизайн, което вдъхнови екипа ни за разработка на прескрийнинг модел за търсене на нови органични материали за технологиите на бъдещето.



Прескрийнинг моделът, разработен в проекта, се основава на *квантово-химични пресмятания* и *алгоритми за машинно обучение*. В рамките на проекта е инициирана база данни, съдържаща случайно избрани 1545 хромофора (<https://github.com/ml4sf/small-drc-dataset>) от базата PubChem QC. Автоматизирани са всички квантово-химични пресмятания от подготовката на файловете до тяхната обработка и е оптимизирана изчислителната процедура с цел да се постигне максимум бързина и ефикасност. Базата данни от 1545 съединения е подложена на анализ като е обучена невронна мрежа, която качествено разпознава молекулите с различен от нула дирадикалов характер. В резултат е сформирана по-малка база от 508 на брой молекули (<https://github.com/ml4sf/small-drc-dataset>), чиито дирадикалов характер варира значително като функция от молекулната структура и свойства, което позволи създаването на линеен регресионен модел за предсказване на дирадикалов характер от ниво PUHF/6-31G\*\* на база евтино пресметнати с полуемпирични методи дескриптори. Проведен е и нейерархичен анализ на групата от 508 обекта (въз основа на 24 дескриптора), които са класифицирани посредством k-средни алгоритъм. Представената класификация служи като модел „отпечатък“ за намиране на подобни структури и тяхното сортиране към дадената група на подобие спрямо дескрипторните характеристики, което позволява формулиране на нови стратегии за дизайн на органични материали за фотоволтаиката и фотониката.

В изпълнението на работната програма по проекта участва един млад учен – *гл. ас. д-р Румен Ляпчев* и са обучени двама студенти от бакалавърско ниво – *Илия Кичев* и *Гергана Костадинова*, както и двама студенти от магистърско ниво – *Йоанна Стойчева* и *Любен Бориславов*. Благодарение на финансовата подкрепа от проекта Любен Бориславов и Гергана Костадинова имаха възможността да представят проекта на две международни научни конференции. Резултатите са публикувани в нерефериран сборник към “International Conference on Energy, Environment and Storage of Energy” (https://iceesen.com/ ) 2020, с автори: Lyuben Borislavov, Miroslava Nedyalkova, Rumen Lyapchev, Gergana Kostadinova, Joanna Stoycheva, Ilia Kichev, Vesselin Petrov, Alia Tadjer and Julia Romanova. Подготвя се и ръкопис за научно списание с импакт фактор.