

## Grupo Especializado en Química y Computación (GEQC)

Tras deliberación y con el visto bueno de la Presidente, el fallo del comité designado para evaluar las solicitudes de la VI Convocatoria “Premio a artículos destacados en el área de Química y Computación” publicados en el año 2023, es el siguiente:

1. Otorgar el premio *Juan Bertrán i Rusca* en la categoría predoctoral a:

**Santiago Morandi**, investigador del Institut Català d’Investigació Química, por su trabajo “*Fast evaluation of the adsorption energy of organic molecules on metals via graph neural networks*” (*Nat. Comput. Sci.* 2023, 3, 433–442), por valor de **800 €**.

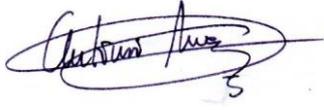
El comité ha valorado la originalidad de su trabajo sobre la evaluación de la energía de adsorción de moléculas orgánicas sobre metales a través de redes neuronales gráficas y el impacto que ha alcanzado su contribución, reflejado tanto en la adopción de su herramienta (puesta a disposición del público) por la comunidad, como en las reseñas que la publicación ha recibido.

2. Otorgar el premio *José Elguero Bertolini* en la categoría postdoctoral a:

Dr. **Rafael García Meseguer**, investigador del Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), por su trabajo “*Insights into the Enhancement of the Poly(ethylene terephthalate) Degradation by FAST-PETase from Computational Modeling*” (*J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 19243-19255), por valor de **800 €**.

El comité ha valorado su completo estudio computacional del mecanismo de la FAST-PETasa utilizando dinámica molecular clásica e híbrida. Destaca el detalle alcanzado en la comprensión del mecanismo y la madurez en la presentación de los objetivos e impacto del trabajo, que ya ha recibido un buen número de citas desde su publicación.

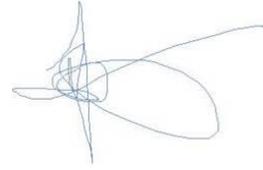
El comité de selección:



Dr. Antonio Márquez Cruz  
Vocal GEQC



Dra. Olalla Nieto Faza  
Vocal GEQC



Dra. Julia Contreras García  
Vocal GEQC

Visto Bueno:



Dra. Carme Rovira  
Presidente GEQC