

Grupo Especializado en Química y Computación (GEQC)

Tras deliberación y con el visto bueno de la Presidenta, el fallo del comité designado para evaluar las candidaturas presentadas a la IV Convocatoria del “Premio a desarrollos metodológicos relevantes en el área de la Química Computacional”, es el siguiente:

Otorgar el premio al:

Dr. Kirill Zinovjev, investigador de la Universitat de València, por su desarrollo “*Electrostatic Embedding of Machine Learning Potentials*” por valor de **800 €**.

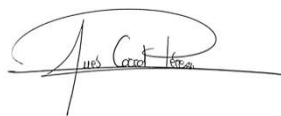
El comité reconoce el desarrollo por presentar una aplicación real del uso de técnicas de aprendizaje automático para generar parámetros electrostáticos de alta calidad y generalizables, basados en cálculos mecano-cuánticos de densidad y polarizabilidad electrónica, publicado en una revista de referencia (*J. Chem. Theory Comput.*) y utilizado por varios grupos de investigación.

Asimismo, El comité destaca la muy alta calidad de todas las propuestas presentadas, agradeciendo a todos los candidatos su participación.

El comité de selección:



Dra. Carme Rovira Virgili
Presidenta GEQC



Dra. Inés Corral Pérez
Tesorera GEQC



Dr. Gonzalo Jiménez-Osés
Secretario GEQC

Visto Bueno:



Dra. Carme Rovira Virgili
Presidenta GEQ