

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 VII Convocatoria “Premio a artículos destacados en el área de Química y Computación” publicados en el año 2024, es el siguiente:

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

Gema Raposo Hernández, investigadora de la Universidad de Sevilla, por su trabajo “*Toward a realistic theoretical electronic spectra of metal aqua ions in solution: The case of $Ce(H_2O)_n^{3+}$ using statistical methods and quantum chemistry calculations*” (*J. Chem. Phys.* **2024**, *161*, 144109), por valor de **800 €**.

El comité ha valorado el avance significativo en la predicción de espectros electrónicos para cationes metálicos de capa abierta en disolución acuosa. La integración de mecánica cuántica relativista altamente correlacionada con dinámica molecular permite simular con precisión los efectos de la temperatura y el entorno de solvatación, logrando una excelente concordancia con los datos experimentales sin el uso de parámetros empíricos.

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

Dr. **Jordi Soler i Parpal**, investigador de la Universitat de Girona, por su trabajo “*Engineering non-haem iron enzymes for enantioselective $C(sp^3)$ -F bond formation via radical fluorine transfer*” (*Nat. Synth.* **2024**, *3*, 958–966), por valor de **800 €**.

El comité ha valorado el carácter innovador del estudio, centrado en la evolución dirigida de metaloenzimas para catalizar la formación de enlaces C-F de manera enantioselectiva, a través de un mecanismo no empleado en la naturaleza basado en la transferencia radicalaria de flúor catalizada por hierro. El trabajo ha sido publicado en una revista de impacto y ya ha recibido un considerable número de citas desde su publicación.

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

El comité de selección:

Dr. Josep Maria Poblet Rius
Vicepresidente GEQC

Dra. Olalla Nieto Faza
Vocal GEQC

Dr. Gonzalo Jiménez-Osés
Secretario GEQC

Visto Bueno:

Dra. Carme Rovira Virgili
Presidenta GEQC