

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 V Convocatoria del “Premio a desarrollos metodológicos relevantes en el área de la Química Computacional”, es el siguiente:

Otorgar el premio al:

Dr. David Dalmau Ginesta, investigador de la Universidad de Zaragoza, por su desarrollo “*ROBERT: Bridging the Gap Between Machine Learning and Chemistry*” por valor de **800 €**.

El comité reconoce el desarrollo por presentar una herramienta abierta de referencia en la automatización de flujos de *machine learning* (ML), simplificando la generación de modelos predictivos con aplicación a problemas comunes de química. El desarrollo ha sido presentado en revistas de referencia (*WIREs: Comput. Mol. Sci.* **2024**, *14*, e1733; *Chem. Sci.*, **2025**, *16*, 8555) y ya está siendo utilizado por grupos de investigación y en actividades formativas.

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. Olalla Nieto Faza
Vocal GEQC

Dr. Gonzalo Jiménez-Osés
Secretario GEQC

Visto Bueno:

Dra. Carme Rovira Virgili
Presidenta GEQ