

La Inteligencia artificial en la investigación química

Mesa redonda con los investigadores
David Balcells, Sílvia Osuna e Israel Fernández

Jesús Campos¹ y Uxue Uria²

¹ Instituto de Investigaciones Químicas (IIQ) CSIC, Universidad de Sevilla

² Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Universidad del País Vasco (UPV/EHU)

² Comité editorial Anales de Química de la RSEQ

La inteligencia artificial (IA) está revolucionando tanto la investigación como la industria química gracias al avance vertiginoso que está experimentando en los últimos años. Muchos analistas predicen que su impacto será mayor que el obtenido previamente con Internet. Queda patente que la IA ha modificado la forma en la que los químicos de hoy en día hacen frente a problemas complejos, empleando algoritmos que aceleran el diseño molecular, predicen la toxicología y las relaciones estructura-actividad, facilitan la optimización de reacciones químicas, hasta laboratorios automatizados en los que robots inteligentes mejoran los resultados experimentales con un alto grado de autonomía. Así pues, su impacto parece extenderse prácticamente a la totalidad de la ciencia química. Un claro ejemplo del alto impacto que ha proporcionado en diferentes áreas es la concesión de la mitad del Nobel de Química por el uso de IA para predecir la estructura de proteínas y para el diseño de nuevas proteínas, así como el Premio Nobel de Física al desarrollo de redes neuronales. En esta mesa redonda, tenemos la suerte de contar con David Balcells, Sílvia Osuna e Israel Fernández, profesores de las universidades de Oslo, Girona y Complutense de Madrid, respectivamente, y líderes internacionales en diversas áreas de la química computacional y la inteligencia artificial.

Muchas gracias por estar hoy con nosotros. Volviendo a los Premios Nobel de este año, ¿esperabais que ambos premios se centraran en el desarrollo y uso de la inteligencia artificial?

David: Sí que me esperaba un premio Nobel centrado en este tema tan importante, aunque no tan pronto. Lo que más ha impactado a mis colegas físicos, es que los premios en parte fueran destinados a informáticos, como es el caso de Geoffrey Hinton en física y Demis Hassabis en química. Creo que esto refleja el carácter realmente multidisciplinar de esta investigación y la necesidad de un grupo multidisciplinar de personas para trabajar en este campo.

Israel: Creo que a los químicos no nos ha impactado tanto porque ya estamos acostumbrados a que se concedan a investigadores que no son estrictamente del área. Los últimos años no ha sido así, pero antes, los premios Nobel de química se

destinaron a biólogos o biólogos moleculares. En física están acostumbrados a que se lo otorguen a físicos o físico-matemáticos y de ahí la controversia generada. No obstante, uno se puede esperar cualquier cosa desde que le dieron a Bob Dylan el premio Nobel de literatura. De todas maneras, era hasta cierto punto predecible que el desarrollo del programa Alpha-Fold2 recibiera un gran reconocimiento, debido al impacto innegable que ha tenido (y tiene) en la comunidad científica y en la sociedad. Lo discutible podría haber sido el área asignada al premio, por ejemplo, medicina en vez de química. De hecho, anteriormente, los premiados también fueron galardonados con el BBVA-Fronteras del Conocimiento en biología y biomedicina dado que el de química no existe.

Sílvia: Otro aspecto que ha sorprendido mucho es que la mitad del Nobel de química fuese para una empresa, aunque ésta es la realidad de hoy en día. Hay muchas compañías con un interés elevado en investigar en el campo de diseño de proteínas y análisis de secuencias mediante la aplicación de la IA y de ahí el premio Nobel destinado a éstos.

¿Creéis que en el futuro los Premios Nobel no serán principalmente para físicos, químicos, médicos o literatos, sino que cada vez existirá un porcentaje mayor para informáticos?

David: Creo que la academia sueca debería revisar los premios, expandir o redefinir disciplinas, como puede ser Ciencia Computacional (*Computer Science*). Un ejemplo, puede ser la medalla Fields en matemáticas, premio equivalente al Nobel.

¿Cuál es la ventaja primordial de la IA como herramienta?

Sílvia: El avance que ha sufrido la generación de modelos para predecir la estructura de proteínas ha sido espectacular. En el campo de diseño de proteínas, lo que antes se hacía en años, ahora se puede hacer mucho más rápido y además con la certeza de que los modelos generados son precisos. A los científicos que trabajamos en este campo nos ha cambiado la vida de manera positiva. Eso sí, ahora se han involucrado cantidad de empresas grandes con recursos y financiaciones

Los humanos somos seres inteligentes, y la IA puede aumentar esa inteligencia. Por supuesto, lo mismo ocurre con la estupidez.

mucho mayores a las nuestras, como es el caso de DeepMind. Ellos nos han enseñado que son capaces de desarrollar una red neuronal que funciona muy bien en poco tiempo. En definitiva, es un lujo poder estar trabajando en este campo de tanto interés con la ventaja de tener todas las herramientas que han estado creando, aunque exista una gran competencia y los académicos no podamos competir frente a estas empresas.

Israel: Nunca vamos a poder competir academia con empresa. Nosotros, incluso con la máquina más potente, podemos tardar un par de días en obtener el resultado de un cálculo, pero ese tiempo para una empresa es una barbaridad. Ellos lo pueden (lo necesitan) conseguir en 10 minutos. Queda patente que la IA es una herramienta potente y que, por supuesto, es positivo el avance que ha generado y el tiempo que nos ahorra para llegar al objetivo deseado.

David: En general veo mucho escepticismo con la inteligencia artificial, pero yo soy optimista. Los humanos somos seres inteligentes y la IA puede aumentar esa inteligencia. Por supuesto, lo mismo ocurre con la estupidez. Creo que es positivo que las empresas estén más implicadas en el campo. La química teórica y computacional era de frikis, incluso dentro del mundo de la química. Pero ahora, Google y otras grandes empresas han puesto este campo en el centro, haciendo química teórica y computacional a un nivel muy avanzado. Cuando viene un estudiante o un postdoc a mi grupo, en ocasiones su ambición es ir a trabajar a una de estas empresas y desean formarse en ese sentido. Desde un punto de vista formativo, y teniendo en cuenta que la mayoría de estudiantes van a ir al sector privado / industrial, la implicación de una mayor cantidad de empresas es una buena noticia. En cuanto a las ventajas que nos ofrece la IA como herramienta, decir que nosotros estamos en el campo de la exploración del espacio químico y evidentemente es alucinante lo que puedes hacer con estos modelos. Es decir, si antes teníamos en mente explorar decenas o centenares de sistemas, ahora puedes explorar decenas de miles o incluso espacios con billones de sistemas. También pueden existir problemas dado que es necesario un uso responsable de los grandes modelos de lenguaje y se debe evitar el uso dual. No obstante, está en nuestras manos realizar un uso adecuado, de momento aún somos nosotros los que tenemos el control.

Recordemos que la mitad del Premio Nobel ha sido para una empresa. ¿Hasta qué punto está en nuestras manos que esta herramienta/tecnología sea para tener un futuro mejor y no lo contrario?

Silvia: Muchos investigadores hemos firmado la iniciativa de realizar un uso responsable de la IA para una aplicación positiva, y no para recursos militares o armas. De todas formas, es un tema delicado porque en el listado de firmantes hay muchos académicos, pero necesitamos que las empresas también tengan el mismo compromiso.

Israel: Hay que tener mucho cuidado porque el problema son los malos que siempre están ahí. De hecho, uno de los inventores pioneros en el desarrollo de la IA se está echando para atrás y pide una legislación clara y rigurosa (no vayamos a acabar como con Skynet en Terminator...).

Las licencias y la regulación de las mismas es un debate recurrente. Hay modelos completamente abiertos, algunos abiertos pero con restricciones de uso, otros accesibles sólo a través de servidores... ¿Qué opináis, publicación en abierto o con restricciones?

Silvia: En el caso concreto de Alpha-Fold2, que se hiciera público ha sido la clave de todo y, de hecho, creo que ha sido el detonante para tener el Premio Nobel. Gracias a que la gente lo ha empleado en multitud de diferentes casos y para diferentes fines, se ha podido demostrar su potencial e impacto.

Israel: Es un negocio, al igual que ocurre con las revistas cuando se publica en abierto o pagando. Si lo publicas en abierto, desde luego tienes el peligro de que se emplee con fines maliciosos, pero ya está accesible para todo el mundo y siempre habrá alguien que lo use con fines positivos. Supongo que una cosa debería compensar la otra.

David: Yo también estoy totalmente a favor de la aproximación en abierto. Creo que para que haya colaboración y verificación, las licencias tienen que ser abiertas. En mi opinión el peligro está en la industria, donde las licencias pueden suceder en cerrado, pero es algo que se ha de respetar. En todo caso, son las instituciones públicas gubernamentales las que deben replantearse por qué esa investigación puntera está sucediendo en empresas y no en entidades públicas. Igual debería invertirse más o hacer un cambio de políticas. Por otro lado, en el modelo abierto puede haber riesgos, como el uso dual de modelos para hacer armamento químico, pero imagino que hacen falta unos recursos que no son tan fáciles de conseguir. Sin duda hay un peligro, pero igual el peligro no es tan inminente o grande como quizás algunas personas piensan.

Cuando se trabaja con IA se necesita una gran cantidad de datos para realizar el entrenamiento, siendo la calidad de los mismos directamente proporcional a la eficacia del algoritmo. ¿Hasta qué punto son fundamentales los datos que empleamos para que los resultados sean relevantes?

David: Éste es un tema crítico. Normalmente estas metodologías brillan con gran cantidad de datos, y no solo el tamaño es importante, sino su complejidad también. Además, existen otras cuestiones importantes, como el coste energético. Al menos en química teórica y computacional, muchas veces trabajamos con datos sintéticos que hay que generar con el coste energético que ello conlleva: almacenar esos datos y tener un acceso continuado de los mismos. Pero en *Machine Learning* no todo son redes neuronales, hay otros métodos que pueden ser eficientes con pocos datos, como los procesos gaussianos. De hecho, desarrollar modelos que sean precisos, transferibles y que se puedan entrenar u optimizar con pocos datos, es un campo de investigación muy activo en IA.

Israel: El éxito del Alpha-Fold2 se debe a que está basado en unos datos muy fiables como es la base de datos de proteínas

(Protein Data Bank) donde hay más de 300000 estructuras. El problema se genera cuando no existen los datos. Yo soy de ascendencia orgánica sintética y nosotros publicamos los buenos resultados, pero lo que no sale, suele acabar en cuadernos de laboratorio que permanecen en completa oscuridad. No obstante, para la IA estos resultados son igual de relevantes y por eso tenemos un problema. Es decir, ¿ahora vamos a obligar a la gente a publicar absolutamente todo? Creo que no damos abasto ni siquiera a publicar los resultados buenos, como para poner los malos. Es más, los que se dedican a hacer cálculos, ¿deben hacer sólo cálculos para sacar datos?, ¿Vamos a trabajar para la gente que se dedica a la IA? No lo veo, eso no es química, o al menos, no la química que me gustaría hacer.

Silvia: En efecto, Alpha-Fold2 se pudo generar gracias a Protein Data Bank. Esta base de datos está bien estructurada, todo el mundo desea incluir sus estructuras nuevas y gracias a este compromiso se ha convertido en una referencia de organización. Pero cuando uno no quiere sólo estructura sino que quiere función, es mucho más complejo porque los datos tienen que ser comparables y de calidad para que puedan servir para entrenar otra IA. Por ejemplo, en el caso de enzimas, si intentas reproducir en tu laboratorio datos cinéticos de un artículo, los resultados pueden ser ligeramente diferentes, lo que conlleva una complejidad añadida.

Comentabais que el trabajo de años se puede hacer ahora en pocos días gracias a Alpha-Fold2. Por lo tanto, estratégicamente, ¿no sería más coherente dedicarnos a generar una gran cantidad de datos de buenisima calidad para tener próximamente un "Alfa function" y así acelerar nuestro desarrollo científico?

David: El problema que existe con la generación de datos es que puede ser un trabajo técnico más que de investigación. De hecho, ahora estamos intentando diseñar centros de investigación en Noruega para IA y en las secciones dedicadas a datos no sabemos qué perfil de personal asignar, si químico o informático.

¿Es demasiado aburrido el trabajo de generar grandes cantidades de datos para alimentar la máquina?

David: Generar datos conlleva diseñarlos. Es decir, cuando trabajas con un espacio químico, hay que pensar muy bien el patrón que genera ese espacio químico, el método que se usa, la evaluación de la calidad de los datos, la actualización, cómo se exponen y transfieren, hay que documentarlo. Este proceso puede implicar desarrollo de inteligencias artificiales para, por ejemplo, automatizar la generación de estructuras. Además, se debe automatizar todo: la producción de los datos, su filtrado, análisis y la solución de problemas. Cuando trabajas a esta escala, normalmente tienes errores con miles de cálculos, y entonces

hay que desarrollar unos métodos para recuperar esos cálculos. En definitiva, no es tan rutinario y estándar como puede parecer y posee elementos de investigación, aunque quizá no sea el elemento más excitante de un proyecto, pero sí muy importante.

¿Corremos el riesgo de perder la belleza, el arte de la exploración química porque le cederemos la capacidad de desarrollar ese arte a la máquina?

David: Yo creo que hay mucha belleza y arte en las máquinas y también exploración y experimentación en el desarrollo de algoritmos de inteligencia artificial. Además, tienen que conectar con la química tanto desde un punto de vista experimental como teórico.

Israel: Discrepo en la concepción de arte. Para mí, ni la química, ni la síntesis ni mucho menos un algoritmo, son arte. Pueden ser bellos o incluso despertar cierta emoción, pero no entran dentro de mi concepción de arte. Pero bueno, esto puede ser debido a mi educación musical clásica...En cualquier caso, sí que creo que la máquina nos puede quitar parte de esa emoción química.

Silvia: Estoy de acuerdo, no nos vamos a emocionar con un nuevo algoritmo (aunque tengo que reconocer que sí me emociono cuando funcionan las enzimas que diseñamos), pero la creatividad es la base del arte y también es la base de todo lo que hacemos en investigación. Desde mi punto de vista esta creatividad es la que ninguna IA nos puede enseñar ni puede hacer. La creatividad de combinar o diseñar diferentes herramientas para conseguir un objetivo. Realmente creo que hay una creatividad y una belleza detrás de todo lo que hacemos. Yo lo quiero ver así. La IA exclusivamente sabe lo que le has dado para entrenar, por lo que no va a predecir algo muy innovador. Por ejemplo, en Drug Discovery, la IA sí te va a dar moléculas, pero seguramente no van a ser muy originales. Entonces, yo creo que lo que tenemos que hacer es combinar: aprovecharnos de lo que la IA hace muy bien, como analizar datos complejos, y nosotros continuar con la creatividad, el diseño de proyectos y las partes más químicas. No creo que la IA tenga poder en este sentido.

Bueno, indirectamente puede que sí tenga poder. La IA puede ser una herramienta que facilita/ desarrolla mucho ciertos campos de trabajo, haciéndolos más atractivos para nuevas investigaciones.

Israel: Sí, claro que tiene poder. Es una herramienta muy poderosa que deberíamos empezar a usar para expandir nuestra creatividad, pero no para limitarla. Si hacemos lo contrario estamos acabados. Como se ha comentado anteriormente, debemos emplear la IA para potenciar nuestra inteligencia, aunque no sabemos si esto puede significar que el homo sapiens puede evolucionar todavía más. ¡Ojala! Ahora mismo estoy enseñando retrosíntesis orgánica al estudiantado de tercero, y me he dado cuenta que Scifinder tiene directamente una herramienta para ello. He metido diferentes moléculas objetivo y, menos una, todas las retrosíntesis han sido perfectas. Entonces, ¿es necesario enseñar estos conceptos? Yo creo que Scifinder te da el resultado lógico, pero no va a poder darte una retrosíntesis creativa e innovadora. No creo que la IA pueda predecir una reacción nueva.

David: No, no creo que pueda. Donde la IA tiene mucho potencial es en problemas combinatorios, en sistemas químicos que se

**La creatividad es la base del arte
y también es la base de todo lo
que hacemos en investigación...**

**esta creatividad es la que ninguna IA nos
puede enseñar ni puede hacer**

construyen a bloques, como puede ser un complejo metálico o un MOF. No va a ser una herramienta que sustituya al químico humano, pero sí una herramienta potente para trabajar con gente muy diferente y para el descubrimiento de nuevos compuestos químicos y materiales. Otro campo muy activo donde la IA se aplica a las ciencias física y química es cuando se implementan los principios de estas ciencias dentro del modelo, de tal manera que la predicción del modelo sea consistente con las leyes ya conocidas. Pero creo que para la IA, los conceptos fundamentales, como podrían ser nuevas reacciones o enlaces químicos, son problemas frontera aún. Uno de los retos en modelos generativos es que el *output* tenga sentido químico, es decir, que un modelo, no te dé carbonos con valencia siete u ocho.

Siempre enfatizas que todavía no se puede, dejando la puerta abierta al futuro.

David: En los últimos años ha habido muchos desarrollos que antes eran impensables. Esto no se va a parar. Sobre todo, cuando hay un interés muy importante, no solo a nivel académico, gubernamental y por parte de las entidades públicas, sino también por las grandes empresas. Sin duda, en 5 ó 10 años se podrán hacer cosas que hoy parecen, sino impensables, como mínimo, muy difíciles.

Y ¿Qué seremos capaces de hacer dentro de esos años?

David: En mi opinión son tres los temas que tienen futuro pero que aún hoy en día son muy difíciles. 1) Modelos generativos multiobjetivo. Muchos problemas de la química son multiobjetivo, como tener que optimizar la actividad, la robustez y la selectividad de un proceso. O en cromóforos, necesitar una absorción intensa y amplia, además de que sea soluble en agua. Por ello, se necesitan modelos generativos donde tú especificas los objetivos que quieres, y el modelo te predice la molécula o el material. Hay algún modelo que empieza a hacer predicciones en este sentido, aunque todavía está lejos. 2) Integrar la IA en sistemas robóticos que operen de manera autónoma y remota en laboratorios. 3) Combinar aprendizaje evolutivo, como son los algoritmos genéticos, con *Deep Learning* (redes neuronales) y otros métodos de *Machine Learning*. Son dos campos que han ido bastante separados pero que podrían funcionar de manera sinérgica por tener propiedades complementarias.

Silvia: Yo creo que el futuro es la combinación de modelos basados en datos y en principios físicos. Además, tal y como decía David, los sistemas multiparamétricos son muy difíciles de solventar, como ocurre en catálisis o en sistemas complejos como proteínas. En mi campo en concreto, en el diseño de enzimas, viendo todo el interés que se ha generado se va a avanzar mucho en los siguientes años y obviamente la IA va a tener un papel muy relevante.

Israel: La IA es una herramienta muy potente que va a usar muchísima gente, y por supuesto, no sólo químicos computacionales. Frank Glorious (Universidad de Münster) es un claro ejemplo, empleando la IA para seleccionar el ligando que mejore los excesos enantioméricos obtenidos en una reacción. Esto creo que es el futuro, emplear la IA como complemento. Creo que seguiremos haciendo química, pero ayudada por la IA. Me recuerda a cuando salieron los primeros cálculos, cuando la gente pensaba que ya no se harían más cinéticas y, no obstante, a día de hoy todavía casi todos seguimos haciéndolas. En definitiva, creo que la IA será una herramienta que utilizaremos

cada vez con más asiduidad, y que nos formaremos todos en ella, aunque no todos queramos.

Teniendo en cuenta todo lo tratado hasta ahora y al hilo de la formación que comentáis que necesitaremos, ¿creéis que la docencia universitaria debería adaptarse a esta nueva era e incluir conceptos relacionados con la IA?

David: Totalmente, los químicos del presente tienen que saber programar y la IA es la excusa perfecta para incluirlo en los programas docentes. Además, debería ser relativamente sencillo, pues se trata de un campo muy abierto en Internet a nivel tanto de código como de datos. No obstante, mi impresión es que, en Europa, aún falta avanzar mucho en este sentido. Yo creo que hay una cierta resistencia por parte del conjunto de docentes que hay en los centros y realmente no lo comprendo. La química es una ciencia eminentemente más experimental y puede que ésa sea la causa de esta resistencia. Además, hay muchos campos, no solamente teóricos o computacionales, sino que también experimentales, en donde la programación puede ser muy útil.

Silvia: Desde mi punto de vista también es totalmente necesario. Cada vez más estudiantes se interesan por la programación o la IA y si hubiera una asignatura más centrada en ello, sería una buena forma de captar estudiantes para química. Yo recuerdo estar haciendo el doctorado en química computacional y que la gente me preguntase por qué no había escogido química orgánica, donde tendría una mejor salida para la industria. Hoy en día esta pregunta ya ni se plantea, quedando reflejado el cambio de mentalidad del estudiantado.

Israel: Yo estoy parcialmente de acuerdo. Si hubiese que incluirlo en la programación de una carrera de química, como mucho, lo incluiría en un máster muy especializado, jamás en el grado. Son muchos los conocimientos necesarios para formarse como químico y el tiempo que tenemos es, desgraciadamente, muy limitado. Estoy harto de escuchar a conferenciantes (normalmente jóvenes) muy buenos programando y prediciendo, pero con problemas en conceptos básicos como puede ser el postulado de Hammond, cosas que yo considero absolutamente básicas para un químico. Si hubiese más tiempo, por supuesto que incluiría una asignatura, incluso desde el primer curso, porque los estudiantes de hoy en día tienen capacidades tecnológicas infinitamente mejores a las que teníamos antes.

Silvia: Pero la programación es algo que se puede aplicar en todos los campos de la química, por lo que sería realmente beneficioso tener una formación en ello.

Israel: Por esa misma razón creo que debería ser en un máster para formar una especialización con todas las aplicaciones posibles que pueda tener la IA dentro de la química. Teniendo en cuenta mi experiencia como docente, y tras comprobar el nivel de conocimiento de la gran mayoría de mis estudiantes, no veo posible reducir contenidos fundamentales para incorporar conceptos de IA en el grado.

David: Entiendo totalmente tu preocupación y creo que, si se enseña programación en el grado, hay que hacerlo conectándolo con la química. Esto es difícil y creo que hay poca gente que sepa hacerlo. No obstante, sé que grandes empresas como Astrazeneca, están desesperadas buscando gente que sepa programar, ciencia de datos, inteligencia artificial y, que además, sepa química. Éste es un perfil muy raro, muy difícil de en-

contrar hoy en día, y creo que somos las universidades los que tenemos que pensar cómo cambiamos las cosas para que sea posible. Por ejemplo, el concepto *Hammett plots* perteneciente a química orgánica, se puede dar como un conjunto de datos que se puede plotear con Python. Es decir, puedes hacer una regresión lineal, el cual es un método de IA, con Python. También, en los últimos años han salido varios artículos fantásticos en *Journal of Chemical Education* sobre cómo implementar este tipo de contenidos en el trabajo experimental de laboratorio. Por ello, a pesar de ser difícil, yo creo que es posible y supongo que va a suceder, aunque sea mediante un proceso largo y complejo. Un problema adicional podría ser el nivel académico con el que llega el estudiantado a la universidad desde la educación básica, pero esto se escapa de nuestras capacidades.

Para terminar, una pregunta más cercana a los lectores de Anales, ¿cómo va a cambiar la vida diaria de un investigador que hace síntesis orgánica, inorgánica o materiales con el desarrollo de la IA en la próxima década?

Israel: Me reitero, para mí, un caso paradigmático es F. Glorious o también M. Sigman. Siguen con su investigación sintética además de tener unos cuantos investigadores dentro del grupo

trabajando para predecir o diseñar. En España, dado cómo son los grupos de investigación, dudo que esto ocurra en un futuro próximo. Más bien, seguro que recurrimos a colaboraciones entre experimentales y teóricos que se dedican a la IA. Se trabajará con gente como David, gente experta en el tema, porque la probabilidad de que lo predicho ocurra es muy alta. Cuando yo aprendí cálculos, mi mentor Fernando Cossío (UPV/EHU) me dijo que había tres tipos de cálculos: los que reproducían el resultado experimental, los que explicaban lo que pasaba y, los mejores, los que predecían. Yo me adhiero a esta visión.

David: Estoy de acuerdo. Yo creo que vamos a seguir con lo que tenemos, pero con una herramienta más potente que nos va a dar más posibilidades. No hay que tenerle miedo, al contrario, vamos a hacer más cosas y mejor, de más calidad.

Sílvia: Y sin duda, más rápido.

Muchas gracias por atendernos y compartir con nosotros vuestras experiencias y reflexiones en torno a la Inteligencia Artificial. Mucha suerte en el futuro y deseamos que sigáis cosechando éxitos dentro del campo.



David Balcells

Hylleraas Centre for Quantum Molecular Sciences, Departamento de Química, Universidad de Oslo, Noruega

C-e: david.balcells@kjemi.uio.no
ORCID: 0000-0002-3389-0543

David Balcells inició su carrera con un doctorado en química computacional bajo la supervisión de Feliu Maseras y Gregori Ujaque, empezando en la UAB y terminando en el ICIQ. Después de un postdoc con Odile Eisenstein (Universidad de Montpellier), obtuvo un contrato Juan de la Cierva en el grupo de Agustí Lledós (UAB). Seguidamente se trasladó a Noruega, donde obtuvo una beca MSCA para iniciar su carrera independiente. En 2020 recibió el premio Joven Investigador de la RSEQ y desde 2021 es investigador principal del centro de excelencia Hylleraas (Universidad de Oslo) liderando el grupo de IA aplicada a química.



Sílvia Osuna

ICREA & Institut de Química Computacional i Catalísi i departament de Química, Universitat de Girona

C-e: silvia.osuna@udg.edu
ORCID: 0000-0003-3657-6469

Sílvia Osuna obtuvo su doctorado en 2010 en la Universidad de Girona (UdG) en el Institut de Química Computacional (IQC). En 2010, se trasladó al grupo del Prof. Houk en la Universidad de California, Los Ángeles (UCLA), con una beca postdoctoral Marie Curie. Sílvia ha sido recientemente galardonada con el Premio Nacional Joven en Química – María Teresa Toral 2023, el premio EuChemS Lecture Award 2021, el Premio Nacional de Investigación de Cataluña – Talento Joven 2019 de la Fundació Catalana de Recerca i Innovació (FCRI), entre otros. Su grupo está centrado en el diseño racional de enzimas y está actualmente financiado por un proyecto del ERC – Consolidator Grant, dos ERC – Proof of Concept grants y dos proyectos nacionales.



Israel Fernández

Departamento de Química Orgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid

C-e: israel@quim.ucm.es
ORCID: 0000-0002-0186-9774

Israel Fernández (Madrid, 1977) obtuvo su doctorado, con premio extraordinario, en la Universidad Complutense de Madrid bajo la dirección del Prof. Miguel A. Sierra y recibiendo el Premio Lilly-Young Investigator. Posteriormente, se unió al grupo de Química Computacional del Prof. G. Frenking en la Philipps Universität Marburg, como investigador postdoctoral. En 2009 recibió el Premio Joven Investigador de la RSEQ, el premio Julián Sanz del Río en 2011 y la Medalla Barluenga en 2020. En la actualidad, I.F. es Catedrático en el departamento de Química Orgánica de la UCM. Su investigación actual incluye el estudio computacional de la situación de enlace y los mecanismos de reacción de compuestos orgánicos y organometálicos, con especial interés en los procesos de formación de enlaces C-C.