

IMPRESO SOLICITUD PARA VERIFICACIÓN DE TÍTULOS OFICIALES

1. DATOS DE LA UNIVERSIDAD, CENTRO Y TÍTULO QUE PRESENTA LA SOLICITUD

De conformidad con el Real Decreto 1393/2007, por el que se establece la ordenación de las Enseñanzas Universitarias Oficiales

UNIVERSIDAD SOLICITANTE	CENTRO	CÓDIGO CENTRO
Universidad Autónoma de Madrid	Facultad de Ciencias (MADRID)	28027060
NIVEL	DENOMINACIÓN CORTA	
Doctorado	Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling	
DENOMINACIÓN ESPECÍFICA		
Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling por la Universidad Autónoma de Madrid; la Universidad Complutense de Madrid; la Universidad Jaume I de Castellón; la Universidad de Barcelona; la Universidad de Cantabria; la Universidad de Extremadura; la Universidad de Murcia; la Universidad de Oviedo; la Universidad de Sevilla; la Universidad de Vigo; la Universidad de las Illes Balears; la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea y la Universitat de València (Estudi General)		
CONJUNTO	CONVENIO	
Nacional	CONVENIO DE COLABORACIÓN ENTRE LAS UNIVERSIDADES PARTICIPANTES PARA LA ORGANIZACIÓN Y DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS CONJUNTAS CONDUCENTES A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO OFICIAL DE DOCTOR O DOCTORA	
UNIVERSIDADES PARTICIPANTES	CENTRO	CÓDIGO CENTRO
Universidad Complutense de Madrid	Facultad de Ciencias Químicas (MADRID)	28027837
Universidad de Barcelona	Facultad de Química (BARCELONA)	08032971
Universidad de Cantabria	Escuela de Doctorado (EDUC) (SANTANDER)	39014543
Universidad de Extremadura	Facultad de Ciencias (BADAJOZ)	06005329
Universidad de las Illes Balears	Facultad de Ciencias (PALMA)	07006071
Universidad Jaume I de Castellón	Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales (CASTELLÓN DE LA PLANA/CASTELLÓ DE LA PLANA)	12004990
Universidad de Murcia	Facultad de Química (MURCIA)	30010218
Universidad de Oviedo	Centro Internacional de Postgrado (OVIEDO)	33024502
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea	Facultad de Ciencias Químicas (DONOSTIA-SAN SEBASTIÁN)	20006274
Universidad de Sevilla	Facultad de Química (SEVILLA)	41008635
Universitat de València (Estudi General)	Instituto Universitario de Ciencia Molecular (BURJASSOT)	46035291
Universidad de Vigo	Facultad de Química (VIGO)	36020556
SOLICITANTE		
NOMBRE Y APELLIDOS	CARGO	
Manuel Alcamí Pertejo	Catedrático de Química Física. Universidad Autónoma de Madrid.	
Tipo Documento	Número Documento	

NIF		05384563X	
<b>REPRESENTANTE LEGAL</b>			
<b>NOMBRE Y APELLIDOS</b>		<b>CARGO</b>	
José María Sanz Martínez		Rector de la Universidad Autónoma de Madrid	
<b>Tipo Documento</b>		<b>Número Documento</b>	
NIF		01082828B	
<b>RESPONSABLE DEL PROGRAMA DE DOCTORADO</b>			
<b>NOMBRE Y APELLIDOS</b>		<b>CARGO</b>	
Isabel Castro Parga		Decana de la Facultad de Ciencias de la UAM	
<b>Tipo Documento</b>		<b>Número Documento</b>	
NIF		50308944D	
<b>2. DIRECCIÓN A EFECTOS DE NOTIFICACIÓN</b>			
A los efectos de la práctica de la NOTIFICACIÓN de todos los procedimientos relativos a la presente solicitud, las comunicaciones se dirigirán a la dirección que figure en el presente apartado.			
<b>DOMICILIO</b>		<b>CÓDIGO POSTAL</b>	<b>MUNICIPIO</b>
C/Einstein, 1. Edificio Rectorado 4º Riso. Ciudad Universitaria de Cantoblanco.		28049	Madrid
<b>E-MAIL</b>		<b>PROVINCIA</b>	<b>FAX</b>
rector@uam.es		Madrid	
<b>3. PROTECCIÓN DE DATOS PERSONALES</b>			
De acuerdo con lo previsto en la Ley Orgánica 5/1999 de 13 de diciembre, de Protección de Datos de Carácter Personal, se informa que los datos solicitados en este impreso son necesarios para la tramitación de la solicitud y podrán ser objeto de tratamiento automatizado. La responsabilidad del fichero automatizado corresponde al Consejo de Universidades. Los solicitantes, como cedentes de los datos podrán ejercer ante el Consejo de Universidades los derechos de información, acceso, rectificación y cancelación a los que se refiere el Título III de la citada Ley 5-1999, sin perjuicio de lo dispuesto en otra normativa que ampare los derechos como cedentes de los datos de carácter personal.			
El solicitante declara conocer los términos de la convocatoria y se compromete a cumplir los requisitos de la misma, consintiendo expresamente la notificación por medios telemáticos a los efectos de lo dispuesto en el artículo 59 de la 30/1992, de 26 de noviembre, de Régimen Jurídico de las Administraciones Públicas y del Procedimiento Administrativo Común, en su versión dada por la Ley 4/1999 de 13 de enero.			
		En Madrid, a ___ de _____ de 2011	
		Firma Representante legal de la Universidad	

## 1. DESCRIPCIÓN DEL TÍTULO

### 1.1. DATOS BÁSICOS

NIVEL	DENOMINACIÓN ESPECÍFICA	CONJUNTO	CONVENIO	CONV. ADJUNTO
Doctorado	Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling por la Universidad Autónoma de Madrid; la Universidad Complutense de Madrid; la Universidad Jaume I de Castellón; la Universidad de Barcelona; la Universidad de Cantabria; la Universidad de Extremadura; la Universidad de Murcia; la Universidad de Oviedo; la Universidad de Sevilla; la Universidad de Vigo; la Universidad de las Illes Balears; la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea y la Universitat de València (Estudi General)	Nacional		Ver anexos. Apartado 1.
<b>ISCED 1</b>		<b>ISCED 2</b>		
Química				
<b>AGENCIA EVALUADORA</b>		<b>UNIVERSIDAD SOLICITANTE</b>		
Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación (ANECA)		Universidad Autónoma de Madrid		

### 1.2 CONTEXTO

CIRCUNSTANCIAS QUE RODEAN AL PROGRAMA DE DOCTORADO
<p>La modelización computacional a nivel molecular se ha afianzando en los últimos 20 años como una herramienta que abarca, de forma transversal, muchas áreas de conocimiento, desde la bioquímica hasta los nuevos materiales, pasando por todas las disciplinas de la química y áreas emergentes como la nanociencia. Además de una capacidad de predecir con gran precisión y a bajo coste los resultados de muchas medidas experimentales, la Química Teórica permite entender las observaciones a un nivel fundamental y dirigir el camino hacia nuevos descubrimientos. En palabras de Pople y Kohn, premios Nobel de química en 1998, "la química cuántica se utiliza hoy en todas las ramas de la química y física molecular y ofrece una profunda comprensión de los procesos moleculares que no puede ser obtenido solamente con la experimentación". Por lo tanto, Química Teórica y Modelización Computacional se han convertido hoy en día en herramientas obligatorias de las ciencias experimentales. Esto ha llevado a que haya una demanda creciente de expertos formados en estos campos. Dicha demanda no viene sólo del mundo de la academia, sino que también empieza a venir desde el campo de la industria, donde cada vez mas empresas ven en la modelización a escala molecular una herramienta que permite avanzar más rápidamente en la síntesis de nuevas sustancias funcionales o nuevos materiales, además de abaratar costes en la obtención de los mismos y el estudio de sus propiedades. El doctorado que se presenta permite formar expertos en éste área que sean capaces de entender los métodos, desarrollar nuevas metodologías, conocer en detalle su rango de aplicación, interpretar los resultados y a aplicar las técnicas de modelización a sistemas de interés.</p> <p>El programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling tiene como fin último preparar investigadores líderes en el uso y desarrollo de los métodos de Química Teórica capaces de trabajar áreas fundamentales de química, física, ciencia de</p>

materiales, nanociencia y bioquímica. Igualmente, producir personal innovador en industrias tales como farmacéuticas, petroquímicas, computacionales o industrias de nuevos materiales.

El carácter interuniversitario del programa de doctorado está justificado en primer lugar por el hecho de que la Química Computacional se utiliza hoy en día en todas las ramas de la Química y la física molecular. Este carácter multidisciplinar hace que sea difícil abarcar desde una sola Universidad todos los campos de aplicación. La oferta de un doctorado interuniversitario permitirá a los estudiantes conocer aplicaciones a distintas áreas y entrar en contacto con investigadores de otras Universidades expertos en técnicas complementarias a las que el estudiante aplica en su tesis. El carácter interuniversitario del programa facilita una amplia colaboración en actividades docentes y de investigación entre profesores, facilita el intercambio de estudiantes y su relación con múltiples profesores, amplía el espacio de aplicación de metodologías al poseer un abanico enorme de líneas de investigación, así mismo, abre un universo mayor de posibilidades a explorar cuando necesite hallar respuesta a un problema científico.

Los grupos de investigación que participan en el doctorado tienen un alto prestigio a nivel internacional, de hecho la Química Teórica en España es un área que tradicionalmente ha tenido un fuerte empuje y un alto nivel científico, con grupos importantes en casi todas las universidades españolas. El programa de doctorado pretende aunar esfuerzos para ofertar una formación común a los estudiantes de todos esos grupos.

Hay que indicar también que el aumento de la capacidad de computación en Europa, a través de los programas HPC (High Performance Computing) y en particular en España con la creación de la RES (Red Española de Supercomputación) está dando un renovado empuje a la modelización a nivel molecular y está haciendo que se puedan abordar sistemas de mayor tamaño, y por lo tanto más próximos a los sistemas experimentales y a las aplicaciones demandadas por la industria. El abaratamiento de los costes de la simulación, está moviendo a muchas empresas a entrar en este área y a crear departamentos de simulación o incluir la simulación como una herramienta adicional en su labor de investigación y desarrollo. Se espera por tanto una creciente demanda de profesionales en este área dentro del sector industrial.

El programa conjunto de doctorado en "Química Teórica y Modelización Computacional" recibió la verificación positiva en 2009 (resolución 15 de Julio de 2009 y corrección de 14 de octubre de 2009) y en él participan las universidades Autónoma de Madrid (coordinadora), Cantabria, Complutense de Madrid, Extremadura, Granada, Illes Balears, Jaime I de Castellón, Murcia, Oviedo, País Vasco/Euskal Herriko

Unibertsitatea, Sevilla, Valencia y Vigo. Como tal programa de doctorado interuniversitario recibió en Julio de 2011 la mención hacia la excelencia por parte del Ministerio de Educación con una puntuación global ponderada de 96/100 (Referencia MEE2011-0153). Dicho doctorado provenía de un doctorado interuniversitario que había recibido la mención de calidad, desde la creación de esta mención, la última mención obtenida fue coordinada por la Universidad del País Vasco (ref MCD2003-00675).

El programa conjunto de doctorado que se presenta supone una modificación del anterior ya que se adapta a la normativa actual (Real Decreto 99/2011), incorpora a una nueva Universidad: la Universidad de Barcelona, y se da de baja del mismo la Universidad de Granada. El correspondiente convenio de colaboración fue firmado en mayo del 2011 entre las universidades Autónoma de Madrid (coordinadora), Barcelona, Cantabria, Complutense de Madrid, Extremadura, Illes Balears, Jaume I de Castellón, Murcia, Oviedo, País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, Sevilla, Valencia y Vigo, con el fin de desarrollar las enseñanzas conjuntas conducentes a la obtención del título oficial de doctor o doctora.

El periodo de formación se estructura en torno a dos Másteres: el "Master en Química Teórica y Modelización Computacional" verificado positivamente (resolución 30/09/2010), en el que participan las Universidades Autónoma de Madrid, Universidad de Cantabria, Universidad de Extremadura, Universidad de las Islas Baleares, Universidad Jaume I, Universidad de Murcia, Universidad de Oviedo, Universidad de Santiago de Compostela, Universidad de Valencia, Universidad de Valladolid y Universidad de Vigo y al que han solicitado su adhesión las Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea y la Universidad de Salamanca y el "Master Interuniversitario de Química Teórica y Computacional" verificado positivamente (Resolución 21/10/2009), en el que participan las Universidades Rovira y Virgili (coordinadora), Universidad de Barcelona, Universidad Autónoma de Barcelona y Universidad de Girona.

Dicho másteres provienen de una colaboración europea que engloba un consorcio de 46 Universidades de ocho países (Bélgica, España, Francia, Holanda, Italia, Polonia, Portugal y Suecia) que estableció en 2004 el Máster en "Theoretical Chemistry and Computational Modelling" y que fue el primer Euromaster en Química que recibió el Eurolabel otorgado por la ECTNA (European Chemistry Thematic Network Association <http://ectn-assoc.cpe.fr/>).

Posteriormente, en 2010, dicho máster fue reconocido como Master Erasmus Mundus, actuando como Universidad coordinadora la Universidad Autónoma de Madrid y como socios las siguientes Universidades: University of Groningen (Holanda), Katholieke Universiteit Leuven, (Belgica), Università degli Studi di Perugia (Italia), Universidade do Porto (Portugal), Université Paul Sabatier -

Toulouse III (Francia) y la Universitat de Valencia (España). En dicho máster se reconoce también la colaboración con las 46 universidades del consorcio indicado anteriormente.

En la actualidad se está en proceso de solicitar un doctorado europeo Erasmus Mundus en las que participarían la Universidad Autónoma de Madrid (coordinadora), como socios las siguientes Universidades: Universidad de Barcelona (España), Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea (España), Universitat de Valencia (España), University of Groningen (Holanda), Katholieke Universiteit Leuven, (Belgica), Università degli Studi di Perugia (Italia), Università di Pisa (Italia), Université Paul Sabatier - Toulouse III (Francia), Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (Francia), Stockholm University (Suecia), Bristol University (Inglaterra), Universität Stuttgart (Alemania), Universität Bonn (Alemania) y Universität Wien (Austria). Ese núcleo de universidades harán de universidades "pivote" por el resto de Universidades implicadas en el doctorado. Debido al creciente interés de la modelización en la industria en esta solicitud del doctorado Erasmus Mundus participan como "associated partners" una serie de empresas que se comprometen a participar en distintas actividades formativas a colaborar en los proyectos de investigación que desarrollen algunos de los doctorandos e incluso a codirigir tesis. Entre estas empresas destacan IBM, Lilly, BASF, Matgas (grupo Air Liquide) y centros de supercomputación europeos como Barcelona Supercomputing Center -BSC-, CINECA en Italia o el High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS).

En cuanto a la integración en una Escuela Doctoral, consideramos que para dar mayor flexibilidad en la gestión y una mejor interacción con programas de doctorado afines (colaboraciones que se establecen normalmente a nivel local en cada Universidad), no se creará una Escuela Doctoral propia sino que se integrará el doctorado dentro de las distintas Escuelas Doctorales que se están creando a nivel local en las respectivas Universidades. En consecuencia, el programa estará inscrito en una o varias Escuelas de Doctorado. En el caso de que el programa se inscriba en varias Escuelas, los equipos de investigación quedarán adscritos exclusivamente a la Escuela constituida o en la que participe la Universidad a la que esté adscrito el personal docente e investigador que compone el equipo de investigación, bajo control académico y estadístico de dicha Escuela.

### **Estudiantes con dedicación a tiempo completo y a tiempo parcial.**

Entre las 13 universidades del convenio se ofertarán en total un número de 55 plazas de nuevo ingreso, de las cuales 4 serán destinadas a estudiantes a tiempo parcial en cualquiera de las universidades. Si no se dispone de doctorandos en esta categoría se usarán como plazas a tiempo completo. La duración de los estudios de doctorado será de un máximo de 3 años a tiempo completo y de un máximo de 5 años a tiempo parcial. Si transcurrido el citado plazo de tres años no se hubiera presentado la solicitud de depósito de la tesis, la comisión responsable del programa podrá autorizar la prórroga de este plazo por un año más, que excepcionalmente podría ampliarse por otro año adicional, previa justificación ante la

Comisión Académica del programa. En el caso de estudios a tiempo parcial la prórroga podrá autorizarse por dos años más que, asimismo, excepcionalmente, podría ampliarse por otro año adicional. A los efectos del cómputo del periodo anterior no se tendrán en cuenta las bajas por enfermedad, embarazo o cualquier otra causa prevista por la normativa vigente. Asimismo, el doctorando podrá solicitar su baja temporal en el programa por un período máximo de un año, ampliable hasta un año más. Dicha solicitud deberá ser dirigida y justificada ante la comisión académica responsable del programa, que se pronunciará sobre la procedencia de acceder a lo solicitado por el doctorando. Según lo dispuesto por el Real Decreto 99/2011 de 28 de enero, por el que se regulan las enseñanzas oficiales de doctorado.

#### LISTADO DE UNIVERSIDADES

CÓDIGO	UNIVERSIDAD
023	Universidad Autónoma de Madrid
010	Universidad Complutense de Madrid
004	Universidad de Barcelona
016	Universidad de Cantabria
002	Universidad de Extremadura
003	Universidad de las Illes Balears
040	Universidad Jaume I de Castellón
012	Universidad de Murcia
013	Universidad de Oviedo
020	Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea
017	Universidad de Sevilla
018	Universitat de València (Estudi General)
038	Universidad de Vigo

### 1.3. Universidad Autónoma de Madrid

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
28027060	Facultad de Ciencias (MADRID)

#### 1.3.2. Facultad de Ciencias (MADRID)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.uam.es/normativadoctoradoUAM">http://www.uam.es/normativadoctoradoUAM</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No

<b>GALLEGO</b>	<b>VALENCIANO</b>	<b>INGLÉS</b>
No	No	Si
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	

### 1.3. Universidad Complutense de Madrid

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
28027837	Facultad de Ciencias Químicas (MADRID)

#### 1.3.2. Facultad de Ciencias Químicas (MADRID)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.ucm.es/bouc/pdf/902.pdf">http://www.ucm.es/bouc/pdf/902.pdf</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

### 1.3. Universidad de Barcelona

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
08032971	Facultad de Química (BARCELONA)

#### 1.3.2. Facultad de Química (BARCELONA)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://postgrau.uab.es/doc/normativa-doctorado-RD99-2001.pdf">http://postgrau.uab.es/doc/normativa-doctorado-RD99-2001.pdf</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS



No	No	Si
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	

### 1.3. Universidad de Cantabria

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
39014543	Escuela de Doctorado (EDUC) (SANTANDER)

#### 1.3.2. Escuela de Doctorado (EDUC) (SANTANDER)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.unican.es/Centros/Escuela-de-Doctorado">http://www.unican.es/Centros/Escuela-de-Doctorado</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

### 1.3. Universidad de Extremadura

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
06005329	Facultad de Ciencias (BADAJOZ)

#### 1.3.2. Facultad de Ciencias (BADAJOZ)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.unex.es/conoce-la-uex/estructura-academica/centros/ciencias/archivos/ficheros/estudiantes/normativa-de-permanencia/Permanencia2010.pdf">http://www.unex.es/conoce-la-uex/estructura-academica/centros/ciencias/archivos/ficheros/estudiantes/normativa-de-permanencia/Permanencia2010.pdf</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS

No	No	Si
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	

### 1.3. Universidad de las Illes Balears

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
07006071	Facultad de Ciencias (PALMA)

#### 1.3.2. Facultad de Ciencias (PALMA)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1242652450852/contenidoFinal/Normativa_de_posgrado_UAM.htm">http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1242652450852/contenidoFinal/Normativa_de_posgrado_UAM.htm</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

### 1.3. Universidad Jaume I de Castellón

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
12004990	Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales (CASTELLÓN DE LA PLANA/CASTELLÓ DE LA PLANA)

#### 1.3.2. Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales (CASTELLÓN DE LA PLANA/CASTELLÓ DE LA PLANA)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.uji.es/bin/infoest/estudis/doctorat/norma.pdf">http://www.uji.es/bin/infoest/estudis/doctorat/norma.pdf</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS

No	No	Si
<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	

### 1.3. Universidad de Murcia

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
30010218	Facultad de Química (MURCIA)

#### 1.3.2. Facultad de Química (MURCIA)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.um.es/web/estudios/contenido/normativa/permanencia">http://www.um.es/web/estudios/contenido/normativa/permanencia</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

### 1.3. Universidad de Oviedo

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
33024502	Centro Internacional de Postgrado (OVIEDO)

#### 1.3.2. Centro Internacional de Postgrado (OVIEDO)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
5	5	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://cei.uniovi.es/c/document_library/get_file?uuid=c8f1b0ed-155c-47e4-84b1-c36b3c3c76d4&amp;groupId=49472">http://cei.uniovi.es/c/document_library/get_file?uuid=c8f1b0ed-155c-47e4-84b1-c36b3c3c76d4&amp;groupId=49472</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si

<b>FRANCÉS</b>	<b>ALEMÁN</b>	<b>PORTUGUÉS</b>
No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	

### 1.3. Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
20006274	Facultad de Ciencias Químicas (DONOSTIA-SAN SEBASTIÁN)

#### 1.3.2. Facultad de Ciencias Químicas (DONOSTIA-SAN SEBASTIÁN)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.ikasketak.ehu.es/p266-shprogct/es/contenidos/informacion/indice_doctorados_vregp/es_normativ/normativa.html">http://www.ikasketak.ehu.es/p266-shprogct/es/contenidos/informacion/indice_doctorados_vregp/es_normativ/normativa.html</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

### 1.3. Universidad de Sevilla

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
41008635	Facultad de Química (SEVILLA)

#### 1.3.2. Facultad de Química (SEVILLA)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://bous.us.es/2011/numero-4/pdf/archivo-12.pdf">http://bous.us.es/2011/numero-4/pdf/archivo-12.pdf</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS

No	No	No
<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>	
No	No	

### 1.3. Universitat de València (Estudi General)

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
46035291	Instituto Universitario de Ciencia Molecular (BURJASSOT)

#### 1.3.2. Instituto Universitario de Ciencia Molecular (BURJASSOT)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.uv.es/fatwirepub/userfiles/file/6.pdf">http://www.uv.es/fatwirepub/userfiles/file/6.pdf</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

### 1.3. Universidad de Vigo

#### 1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
36020556	Facultad de Química (VIGO)

#### 1.3.2. Facultad de Química (VIGO)

##### 1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
5	5	
NORMAS DE PERMANENCIA		
<a href="http://www.uvigo.es/uvigo_es/administracion/alumnado/normativa/">http://www.uvigo.es/uvigo_es/administracion/alumnado/normativa/</a>		
LENGUAS DEL PROGRAMA		
CASTELLANO	CATALÁN	EUSKERA
Si	No	No
GALLEGO	VALENCIANO	INGLÉS
No	No	Si
FRANCÉS	ALEMÁN	PORTUGUÉS
No	No	No

<b>ITALIANO</b>	<b>OTRAS</b>
No	No

## 1.4 COLABORACIONES

LISTADO DE COLABORACIONES CON CONVENIO			
CÓDIGO	INSTITUCIÓN	DESCRIPCIÓN	NATUR. INSTIT
			Seleccione un valor
CONVENIOS DE COLABORACIÓN			
Ver anexos. Apartado 2			
OTRAS COLABORACIONES			

## 2. COMPETENCIAS

2.1 COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES
<b>BÁSICAS</b>
CB11 - Comprensión sistemática de un campo de estudio y dominio de las habilidades y métodos de investigación relacionados con dicho campo.
CB12 - Capacidad de concebir, diseñar o crear, poner en práctica y adoptar un proceso sustancial de investigación o creación.
CB13 - Capacidad para contribuir a la ampliación de las fronteras del conocimiento a través de una investigación original.
CB14 - Capacidad de realizar un análisis crítico y de evaluación y síntesis de ideas nuevas y complejas.
CB15 - Capacidad de comunicación con la comunidad académica y científica y con la sociedad en general acerca de sus ámbitos de conocimiento en los modos e idiomas de uso habitual en su comunidad científica internacional.
CB16 - Capacidad de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance científico, tecnológico, social, artístico o cultural dentro de una sociedad basada en el conocimiento.
<b>CAPACIDADES Y DESTREZAS PERSONALES</b>
CA01 - Desenvolverse en contextos en los que hay poca información específica.
CA02 - Encontrar las preguntas claves que hay que responder para resolver un problema complejo.
CA03 - Diseñar, crear, desarrollar y emprender proyectos novedosos e innovadores en su ámbito de conocimiento.
CA04 - Trabajar tanto en equipo como de manera autónoma en un contexto internacional o multidisciplinar.
CA05 - Integrar conocimientos, enfrentarse a la complejidad y formular juicios con información limitada.
CA06 - La crítica y defensa intelectual de soluciones.
<b>OTRAS COMPETENCIAS</b>
CE01 - Aplicar la Química Teórica y Computacional a la resolución de problemas en diversas ramas de la Ciencia como son la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.
CE02 - Capacidad de modelizar un proceso químico empleando los paquetes informáticos más comunes.
CE03 - Capacidad de emplear la programación como herramienta para solucionar problemas químicos.
CE04 - Capacidad de escribir artículos científicos en su área de especialización en Química Teórica y Computacional.
CE05 - Capacidad de conocer y relacionarse con los principales grupos que trabajan en Europa en Química Teórica y Computacional
CE06 - Ser capaz de concebir, diseñar, poner en práctica y adoptar un proceso sustancial de investigación con seriedad académica y rigor científico.

## 3. ACCESO Y ADMISIÓN DE ESTUDIANTES

3.1 SISTEMAS DE INFORMACIÓN PREVIO
------------------------------------

Perfil de ingreso recomendado o idóneo.

Se recomienda que los estudiantes que accedan al doctorado en su periodo de investigación, idealmente, hayan cursado y por ende adquirido las capacidades, destrezas y conocimientos que otorga el Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional/ Theoretical Chemistry and Computational. Aquellos candidatos que no han seguido el máster anterior pero están en posesión de un título oficial de Máster Universitario en Química, Física, Ciencias de los Materiales, Bioquímica, o algún otro del mismo nivel, que provea al postulante de un conocimiento adecuado para seguir el doctorado puede ser considerado como candidato. Los candidatos que no provengan del máster en Química Teórica y Modelización Computacional/ Theoretical Chemistry and Computational y muestren deficiencias en su formación en química teórica y modelización computacional podrán realizar complementos de formación a consejo de su director y, en el caso, codirector o por solicitud de la Comisión Académica del doctorado. El lenguaje a emplear, en el periodo formativo que otorga el máster en Química Teórica y Modelización Computacional/ Theoretical Chemistry and Computational, es el inglés con nivel B2. Por lo tanto, en el periodo de investigación es muy recomendable poseer suficiencia en esta lengua.

Mecanismos de información previos a la matrícula y orientación de estudiantes de nuevo ingreso. Toda persona interesada en el programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional podrá acceder a la información relativa a requisitos de acceso y admisión a través de la página web oficial de la trece universidades implicadas en el convenio.

Como ejemplo se cita la página de la Universidad Autónoma, en su apartado Doctorados:  
[http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1242656800030/1242656811795/doctorado/doctorado/Doctorado\\_en\\_Quimica\\_Teorica\\_y\\_Modelizacion\\_Computacional.htm](http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1242656800030/1242656811795/doctorado/doctorado/Doctorado_en_Quimica_Teorica_y_Modelizacion_Computacional.htm)

Dicha página enlaza a las páginas web oficiales de las universidades participantes.

En estas página se especifica tanto las vías y requisitos de acceso, como el perfil de ingreso recomendado, tanto en lo que se refiere a conocimientos previos, como al nivel recomendado de inglés. Esta información es común para todas las Universidades participantes y está descrita en detalle en el punto 3.2 de la presente memoria.

Es de destacar que debido al carácter interuniversitario del doctorado y sus conexión con iniciativas a nivel internacional (Erasmus Mundus Doctorate solicitado y Erasmus Mundus Master como parte formativa, ya concedido), el programa de doctorado y master a nivel internacional cuenta con una página web propia

<http://www.emtccm.org/tccm-jd>

<http://www.emtccm.org/tccm-em>

Desde esa página se ofrece también toda la información de acceso y está especialmente orientada a la captación de estudiantes de países de fuera de la UE

Además de los correos electrónicos de los servicios de posgrado de las universidades, donde los estudiantes pueden preguntar sus dudas sobre el proceso de admisión, el programa de doctorado cuenta con una dirección institucional propia ([emtccm@uam.es](mailto:emtccm@uam.es)) desde donde se atienden todas las dudas de estudiantes nacionales o internacionales, incluidas las relativas al proceso de registro y admisión y desde donde se orienta sobre los distintos plazos, recomendaciones de estudios previos y posibilidades de financiación.

Un objetivo estratégico del programa de doctorado es tener una alta visibilidad que permita la captación de estudiantes tanto a nivel nacional como internacional. Es por eso que además de participar en las distintas ferias organizadas a nivel mundial por el programas Erasmus Mundus, se realiza una política activa de promoción del doctorado y su master asociado a través de distintas páginas web. Actualmente se están utilizando:

- Simply Hired:

<http://www.simplyhired.com/a/jobs/list?q=computational+chemist>

- European Campus Plataform:

<http://master.europeancampus.eu/em-tccm/>

- Madrid I+D:

[http://www.madrimasd.org/Empleo/InscripcionDemandaProfesional/mostrar\\_oferta.asp?](http://www.madrimasd.org/Empleo/InscripcionDemandaProfesional/mostrar_oferta.asp?Codigo=9300&CodAmbito=OE&Buscador=NOK)

[Codigo=9300&CodAmbito=OE&Buscador=NOK](http://www.madrimasd.org/Empleo/InscripcionDemandaProfesional/mostrar_oferta.asp?Codigo=9300&CodAmbito=OE&Buscador=NOK)

-Master Portal:



<http://www.mastersportal.eu/students/browse/programme/14220/theoretical-chemistrycomputational-modelling.html>

- Find a Master:

<http://www.findamasters.com/sear>

- Scholarships Position:

<http://scholarship-positions.com/erasmus-mundus-scholarship-masters-ontheoretical-chemistry-and-computational-modelling-2012/2011/09/09/>

- Nature Jobs:

<http://www.nature.com/naturejobs/science/jobs/220363>

- Study in Europe:

<http://www.study-info.eu/>

- Molecular Dynamics News:

<https://www.jiscmail.ac.uk/cgi-bin/webadmin?A2=ind1109&L=MOLECULAR-DYNAMICS-NEWS&P=R1110&1=MOLECULAR-DYNAMICSNEWS&9=A&J=on&d=No+Match%3BMatch%3BMatches&z=4>

- Emagister ( servicio contratado):

<http://www.emagister.com/master-theoretical-chemistry-andcomputational-modelling-cursos-2803569.htm>

- Universia:

<http://becas.universia.es/ES/beca/71755/erasmus-mundus-scholarships-for-the-europeanmaster-in-theoretical-chemistry-and-computational-modelling.html>

- Dicamatica:

<http://dicamatica.blogspot.com/>

Para acceder al Programa de Doctorado será necesario estar en posesión de los títulos de oficiales españoles de Grado, o equivalente y de Máster Universitario.

Se recomienda que los estudiantes que accedan al doctorado hayan cursado un grado en Química, Física, Ciencias de los Materiales o áreas afines y que hayan realizado al menos 60 ECTS en el master en "Química Teórica y Modelización Computacional", el master "Química Teórica y Computacional" o másteres en las áreas de Química, Física, Ciencias de los Materiales con un importante contenido teórico y orientación investigadora.

Además podrán acceder al programa de doctorado quienes se encuentren en alguno de los siguientes supuestos:

- Estar en posesión de un título universitario oficial español, o de otro país integrante del Espacio Europeo de Educación Superior, que habilite para el acceso a Máster de acuerdo con lo establecido en el artículo 16 del Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre y haber superado un mínimo de 300 créditos ECTS en el conjunto de estudios universitarios oficiales, de los que, al menos 60, habrán de ser de nivel de Máster.
- Estar en posesión de un título oficial español de Graduado o Graduada, cuya duración, conforme a normas de derecho comunitario, sea de al menos 300 créditos ECTS. Dichos titulados deberán cursar con carácter obligatorio los complementos de formación, salvo que el plan de estudios del correspondiente título de grado incluya créditos de formación en investigación, equivalentes en valor formativo a los créditos en investigación procedentes de estudios de Máster.
- Estar en posesión de un título obtenido conforme a sistemas educativos extranjeros, sin necesidad de su homologación, previa comprobación por la universidad de que éste acredita un nivel de formación equivalente a la del título oficial español de Máster Universitario y que faculta en el país expedidor del título para el acceso a estudios de doctorado. Esta admisión no implicará, en ningún caso, la homologación del título previo del que esté en posesión el interesado ni su reconocimiento a otros efectos que el del acceso a enseñanzas de Doctorado.
- Estar en posesión del Diploma de Estudios Avanzados obtenido de acuerdo con lo dispuesto en el RD 778/98, de 30 de Abril, o hubieran alcanzado la Suficiencia Investigadora según lo regulado por el RD 185/85, de 23 de enero.

- Estar en posesión de otro título español de Doctor obtenido conforme a anteriores ordenaciones universitarias.

Los dos máster indicados ("Química Teórica y Modelización Computacional" y "Química Teórica y Computacional") constituyen la vía de acceso más habitual para los estudiantes de este programa de doctorado y aseguran que se posee los conocimientos previos necesarios para acceder al doctorado. Sin embargo, no constituyen la vía exclusiva de entrada, considerándose de una forma muy especial otros másteres de orientación investigadora impartidos en las universidades participantes. A los estudiantes que accedan habiendo estudiado previamente otros másteres se les podrá exigir realizar parte de las asignaturas de dichos másteres como complementos de formación.

### **CRITERIOS DE ADMISIÓN.**

Los estudiantes que cumplan los requisitos detallados anteriormente, podrán ser admitidos en el programa de Doctorado. La **Comisión Académica del Programa de Doctorado** en "Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling", cuya composición se detalla en el apartado 8.1, analizará las solicitudes de admisión valorando los siguientes aspectos y méritos:

- El CV del candidato.
- Las calificaciones obtenidas por el candidato en el grado y/o máster que haya realizado.
- Las publicaciones derivadas de la tesis de máster serán un significativo valor añadido.
- El prestigio de la Universidades en la cuales el candidato obtuvo su título de grado y de máster.
- Certificado de Nivel de inglés, mínimo recomendado B2.
- Una carta de motivación donde se explique el trabajo de investigación a realizar.
- Todas las actividades que el candidato realizó en sus estudios de máster.
- El nombre de dos personas quienes puedan ser contactadas como referencias.

Se aplicarán los mismos criterios para admitir a todos los estudiantes independientemente que su dedicación sea a tiempo completo o parcial

En aquellos casos en los que la comisión académica considere que la formación previa del candidato no es suficiente o no es adecuada para el acceso al programa de doctorado, se podrá exigir que se realicen complementos de formación específica. Esos complementos serán asignaturas del primer curso del master de "Química Teórica y Modelización Computacional" o del master de "Química Teórica y Computacional", hasta un máximo de 60 ECTS. Estos complementos de formación específica tendrán consideración de formación de nivel de doctorado y se realizarán a precios públicos. El tiempo que se dedique a esta formación específica no se computará a efectos del límite de 3 años a contar desde la admisión del doctorando al programa hasta la presentación de la tesis doctoral, tal y como establece el artículo 3.2 del RD99/2011.

La comisión de ordenación académica evaluará en detalle las solicitudes provenientes de estudiantes con necesidades educativas específicas derivadas de su discapacidad. En estos casos se establecerán, en el proceso de admisión, los mecanismos de apoyo necesarios para que el estudiante pueda completar con éxito los estudios y se estudiarán de forma individualizada las posibles adaptaciones curriculares.

El programa de doctorado, y de acuerdo con las normativas existentes en las Universidades participantes, contempla la realización de estudios de doctorado a tiempo parcial, teniendo en este caso el estudiante un límite de cinco años desde la admisión al programa hasta la presentación de la tesis doctoral. Los estudiantes podrán cambiar de modalidad de tiempo parcial a completo o viceversa, previa solicitud y aprobación por parte de la comisión académica.

En el caso de que un estudiante no haya presentado la solicitud de depósito de la tesis en el plazo de tres años desde su admisión, la comisión académica del programa de doctorado podrá autorizar la prórroga de este plazo por un año más, que excepcionalmente podría ampliarse por otro año adicional. En el caso de estudios a tiempo parcial la prórroga podrá autorizarse por dos años más que, asimismo, excepcionalmente, podría ampliarse por otro año adicional. En todos los casos será necesario que el estudiante presente una solicitud a la comisión académica y esta analizará los motivos alegados para justificar la concesión o no de la prórroga.

Asimismo, el doctorando podrá solicitar su baja temporal en el programa por un período máximo de un año, ampliable hasta un año más. Dicha solicitud deberá ser dirigida y justificada ante la comisión académica responsable del programa, que se pronunciará sobre la procedencia de acceder a lo solicitado por el doctorando.

Siendo conscientes de la necesidad de fomentar la participación de mujeres e individuos de grupos minoritarios en carreras de ciencia y tecnología, el programa seguirá los principios contenidos en "Estrategia de recursos humanos para la investigadores incorporación de la carta y código (Human Resources Strategy for Researchers Incorporating the Charter & Code)", que la comisión europea ha emitido para promover directrices para los contratos de personal de investigación.

### 3.3 ESTUDIANTES

El Título está vinculado a uno o varios títulos previos

#### Títulos previos:

UNIVERSIDAD	TÍTULO
Universidad Autónoma de Madrid	Doctor en Programa Oficial de Posgrado Europeo en química teórica y modelización computacional
Universidad de Barcelona	Programa Oficial de Doctorado en Química Teórica y Computacional
Universidad Jaume I de Castellón	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en Theoretical Chemistry and Computational Modelling
Universidad de Murcia	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en química teórica y modelización computacional
Universidad de Oviedo	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en química teórica y modelización computacional
Universitat de València (Estudi General)	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en química teórica y computacional
Universidad de Vigo	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en química teórica y modelización computacional

#### Últimos Cursos:

CURSO	Nº Total estudiantes	Nº Total estudiantes que provengan de otros países
Año 1	62.0	4.0
Año 2	72.0	15.0
Año 3	74.0	21.0
Año 4	75.0	19.0
Año 5	72.0	20.0

### 3.4 COMPLEMENTOS DE FORMACIÓN

La vía de acceso recomendada para el programa de doctorado es la realización de un grado en Química, Física o Ciencia de Materiales y la posterior realización de uno de los dos másteres oficiales siguientes:

el Máster en Química Teórica y Modelización Computacional o el master en Química Teórica y Computacional.

En aquellos casos en que el estudiante haya realizado un grado o un master distinto a los indicados la comisión académica podrá establecer complementos de formación que serán, en cualquier caso, asignaturas del primer año de los citados másteres hasta un máximo de 30 créditos.

En aquellos casos en los que la vía de acceso sea un grado cuya duración sea de 300 ECTS y no se haya realizado ningún máster previo, la realización de estos complementos formativos será obligatoria, salvo que el correspondiente plan de estudios contemple créditos de formación en investigación.

En todos los casos será la comisión académica del doctorado la que decida los complementos de formación a realizar por cada estudiante a la vista de su historial académico previo.

Las asignaturas del primer año de los másteres mencionados están centradas en:

- Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
- Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación
- Simetría en átomos, moléculas y sólidos
- Técnicas Computacionales y Cálculo Numérico
- Métodos de la Química Teórica I
- Métodos de la Química Teórica II

Estas asignaturas se podrán realizar a nivel local o en cursos intensivos organizados de forma conjunta por las Universidades participantes.

#### 4. ACTIVIDADES FORMATIVAS

4.1 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD: Asistencia a seminarios de investigación		
4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS	
DESCRIPCIÓN		
El número de horas por año es indicativo.		

Actividad que consistente en la asistencia a seminarios impartidos por investigadores vinculados al programa de doctorado e investigadores invitados de reconocido prestigio (preferiblemente de centros de investigación extranjeros). El objetivo es que cada semana durante el período lectivo, un investigador explique en un seminario su trabajo de investigación a todos los alumnos del programa de doctorado. La lengua en la que se imparte es preferentemente el inglés.

Se recomienda con carácter general, sean estudiantes a tiempo parcial o completo, la asistencia a 10 seminarios por año, impartidos en la universidad del estudiante.

Se espera que con esta actividad el estudiante sea capaz de demostrar la adquisición de las competencias: CB11, CB15, CA05, CE01 y CE05.

#### 4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

El tutor del doctorando incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de asistencia a seminarios. Este documento se remitirá a la comisión académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando.

No será necesaria una certificación de los seminarios a los que se asista, siendo sólo necesaria la firma del informe por el tutor o el director.

#### 4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

Esta actividad, al tratarse de seminarios locales, no implica movilidad.

#### ACTIVIDAD: Asistencia a cursos especializados

##### 4.1.1 DATOS BÁSICOS

Nº DE HORAS

80

##### DESCRIPCIÓN

El estudiante podrá acudir a cursos de formación especializados que le permitan acceder a un mayor conocimiento de las técnicas y métodos específicos que utilizará en la realización de su tesis doctoral. Estos cursos en general estarán organizados por grupos de investigación y centros ajenos al programa de doctorado (por ejemplo los cursos organizados por el Centro Europeo de Calculo Atómico y Molecular CECAM, en alguno de sus nodos). Los cursos son en general entre 3 y 5 días y se imparten normalmente en inglés.

Aunque la realización de este tipo de cursos no es obligatoria, se recomienda la asistencia a un curso de formación especializado a lo largo del periodo de realización de la tesis doctoral. En el caso de estudiantes a tiempo parcial también se recomienda la asistencia a uno de estos cursos durante la realización de la tesis doctoral, aunque en estos casos se tendrá en cuenta las limitaciones de fechas y horarios.

En cualquier caso tanto para estudiantes a tiempo completo como parcial será obligatorio realizar al menos dos actividades durante la realización de la tesis doctoral entre asistencia a cursos especializados, asistencia a congresos o la reunión anual del programa de doctorado

Se espera que con esta actividad el estudiante sea capaz de demostrar la adquisición de las competencias CB11, CB14, CB15, CB16, CA05, CA06, CE01, CE02 y CE05.

#### 4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

El tutor del doctorando incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de asistencia a cursos especializados. Se incluirá un certificado de asistencia y el detalle de los contenidos del curso, así como el número de horas lectivas. Este informe se remitirá a la comisión académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando.

#### 4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

La asistencia a estos cursos requerirá en la mayoría de los casos movilidad, ya que habitualmente se imparten en centros distintos a la Universidad de origen del estudiante. En general se realizarán en Universidades y centros de formación de la Unión Europea.

#### ACTIVIDAD: Presentación de trabajos en congresos científicos nacionales o internacionales

4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS	50
---------------------	-------------	----

#### DESCRIPCIÓN

El número de horas es indicativo. Se recomienda con carácter general, tanto para estudiantes a tiempo parcial como a tiempo completo, la participación en al menos en dos congresos científicos durante la realización de su tesis doctoral. El congreso debe ser preferentemente de alto prestigio en el campo de investigación del doctorando y de carácter internacional. En esos congresos el estudiante presentará una contribución científica en forma de contribución oral o poster.

En cualquier caso tanto para estudiantes a tiempo completo como parcial será obligatorio realizar al menos dos actividades durante la realización de la tesis doctoral entre asistencia a cursos especializados, asistencia a congresos o la reunión anual del programa de doctorado.

Regularmente los congresos nacionales o internacionales en el ámbito de la Química Computacional implican la participación del estudiante en presentaciones orales o en poster, sustentados en lengua inglesa.

Esta actividad servirá para desarrollar las competencias: CB11, CB14, CB15, CB16, CA05, CA06, CE01, CE02 y CE05.

#### 4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

El tutor del doctorando incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de trabajos presentados en congresos científicos. En particular se indicará el título y fecha de celebración del congreso, el título y carácter de la presentación (comunicación oral o poster) y se incluirá el resumen



de la misma y el certificado de asistencia. Este documento se remitirá a la comisión académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando.

#### 4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

La asistencia a congresos requerirá en la mayoría de los casos movilidad por lo tanto, podrán ser financiados con cargo a proyectos propios del equipo de investigación en el cual participe el doctorando o con bolsas de viaje otorgadas por la universidad.

#### ACTIVIDAD: Preparación y presentación de dos seminarios formales.

4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS
	50

#### DESCRIPCIÓN

El candidato a doctor, tanto a tiempo parcial o completo, deberá preparar y presentar dos seminarios con carácter formal.

El primero de ellos se realizará en los primeros 18 meses y contendrá la formulación de su plan de trabajo de investigación y los primeros resultados, optativamente podrá ser impartido en castellano o inglés. El segundo de ellos contendrá sus resultados y conclusiones y deberá presentarse previo a la defensa de tesis, sirviendo así como preparación de la misma por lo tanto, el idioma empleado para su impartición será una combinación de inglés y castellano.

Ambos seminarios podrán tener lugar a nivel local o dentro de la participación de los estudiantes en la reunión anual del doctorado (workshop internacional del programa de doctorado).

El tiempo estimado incluye el tiempo de preparación de los seminarios.

Se espera que el estudiante sea capaz de demostrar su capacidad de comunicación con la comunidad académica y científica y con la sociedad en general acerca de su trabajo de tesis en modo expositivo e idioma inglés (por lo general, siendo también aceptado otra lengua de la comunidad europea); que participe de la crítica y defensa intelectual de soluciones y que demuestre su capacidad de concebir, diseñar, poner en práctica y adoptar un proceso sustancial de investigación con seriedad académica y rigor científico (competencias CB15, CA06 y CE06).

#### 4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

El tutor incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de presentación de seminarios realizados por el candidato a doctor. Este documento se remitirá a la comisión académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando.

#### 4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

En caso de tratarse de seminarios locales no implica movilidad. Si las presentaciones se realizan en la reunión anual del doctorado llevará asociada las correspondiente movilidad para participar en el mismo.

<b>ACTIVIDAD: Asistencia a la reunión anual del doctorado (Workshop internacional) organizado por el programa de doctorado.</b>		
<b>4.1.1 DATOS BÁSICOS</b>	<b>Nº DE HORAS</b>	32
<b>DESCRIPCIÓN</b>		
<p>Cada año se organizará la reunión anual del doctorado de duración entre dos y tres días con el objetivo de reunir nuestros estudiantes y sus directores y tutores en un encuentro científico. Esta reunión se considera fundamental para la cohesión dentro del carácter interuniversitario del programa, ya que será el principal punto de encuentro de los estudiantes con estudiantes y profesores de las otras universidades participantes. En estas reuniones los estudiantes de doctorado realizarán presentaciones orales con los resultados alcanzados hasta ese momento en su actividad investigadora. Estas presentaciones permitirán una valoración de las actividades realizadas. En estos encuentros participarán los estudiantes de las universidades europeas con las que se mantienen acuerdos de colaboración (universidades implicadas en la solicitud de un Erasmus Mundus Joint Doctorate) y tendrá un consideración como "workshop" internacional.</p> <p>Al menos media jornada en estos workshops estará dedicada a cursos donde se desarrollen competencias transversales y competencias transferibles a la industria (organización de proyectos, gestión de calidad, oportunidades para emprendedores...) que favorezcan una posible inserción de los estudiantes en la industria. Se contará en estas reuniones con la colaboración de empresas que apoyan el doctorado.</p> <p>Regularmente el lenguaje de participación será el inglés</p> <p>En cualquier caso tanto para estudiantes a tiempo completo como parcial será obligatorio realizar al menos dos actividades durante la realización de la tesis doctoral entre asistencia a cursos especializados, asistencia a congresos o la reunión anual del programa de doctorado</p> <p>Se espera que con esta actividad el estudiante sea capaz de demostrar la adquisición de las competencias CB11, CB14, CB15, CB16, CA05, CA06, CE01, CE02 y CE05.</p>		
<b>4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN</b>		
<p>Un grupo de profesores de las universidades participantes, incluyendo los socios europeos, participarán en el workshop y llevarán a cabo la valoración de las presentaciones realizadas por cada candidato a doctor, dando especial importancia a la capacidad del doctorando para responder preguntas planteadas.</p> <p>Después del workshop los evaluadores producirán un informe de cada doctorando indicando sus fortalezas y debilidades en su actividad, el cual será enviado tanto a él como a su tutor y director. Toda la información referente a la participación del estudiante en el workshop, la presentación realizada y el informe de los evaluadores, se recogerá en el Documento de Actividades del Doctorando. Dicho documento será remitido por el tutor a la comisión académica del programa de doctorado y se incorporará los datos al registro de actividades del doctorando.</p>		
<b>4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD</b>		
<p>La asistencia a los workshops requerirá movilidad, en la mayoría de los casos los workshops se organizarán de forma rotativa en distintas sedes del doctorado o en las dependencias de instituciones y empresas que colaboran con el mismo.</p>		

<b>ACTIVIDAD: Elaboración de trabajos publicables en revistas de difusión científica.</b>		
<b>4.1.1 DATOS BÁSICOS</b>	<b>Nº DE HORAS</b>	200
<b>DESCRIPCIÓN</b>		
<p>El candidato a doctor participará de forma activa en la redacción de los artículos que recojan los resultados de su investigación y que se publicarán en revistas de carácter científico. Se considera que una parte básica de su formación es adquirir habilidades como escribir en inglés, ser efectivo en la revisión de literatura y búsqueda de información científica preexistente, tener capacidad de síntesis a la hora de presentar los resultados. También deberá aprender todo el proceso que implica la realización de una publicación, contacto con editores, evaluadores y revisión de pruebas de imprenta.</p> <p>Esta actividad será realizada por todos los estudiantes, tanto a tiempo completo como parcial. No se exige un número mínimo de publicaciones en el momento de presentar la tesis, pero será uno de los elementos clave para juzgar la calidad de la misma. Se tendrá en cuenta que puede haber casos en los que resultados obtenidos estén sujetos a protección de propiedad intelectual, lo que puede impedir la publicación de los mismos en revistas científicas.</p> <p>Se espera que con esta actividad el estudiante sea capaz de demostrar la adquisición de las competencias CB13, CB14, CB15, CA02, CA06, CE04 y CE06.</p>		
<b>4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN</b>		
<p>El tutor incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los trabajos publicados en revistas científicas en las que el candidato a doctor tenga algún grado de colaboración. Se indicará brevemente el grado en el que el estudiante ha estado involucrado en la preparación y redacción de la publicación. Este documento se remitirá a la comisión académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando.</p>		
<b>4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD</b>		
<p>Esta actividad no implica movilidad.</p>		
<b>ACTIVIDAD: Estancias de investigación en centros extranjeros.</b>		
<b>4.1.1 DATOS BÁSICOS</b>	<b>Nº DE HORAS</b>	640
<b>DESCRIPCIÓN</b>		
<p>Se recomienda que todos los estudiantes realicen durante su doctorado al menos una estancia de 3 meses en un centro de investigación extranjero.</p> <p>Estas estancias tendrán como fin principal realizar parte de investigación, pero se considera una pieza fundamental en la formación de los doctores, ya que supondrá: conocer otros sistemas educativos y de investigación, acceder a seminarios y cursos realizados en otras universidades, mejorar su conocimiento de una segunda lengua y crear su red propia de contactos. Todos ellos son aspectos fundamentales en la formación del doctorando. Además la realización de esta estancia es un requisito para obtener la mención</p>		

internacional al título de doctor, que se fomentará para todos los estudiantes del programa. El número de horas indicados refiere al tiempo que se considera que el estudiante dedicará a actividades formativas: aprendizaje de nuevas técnicas, asistencia a cursos y seminarios.

Se entiende que la mayoría de estudiantes a tiempo parcial tendrán dificultades para realizar estas estancias, por lo que en estos casos se consideraran estancias más cortas o la división de la estancia en varios periodos.

Regularmente, para este tipo de estancias se emplea el idioma inglés como lenguaje universal de la ciencia.

Se espera que con esta actividad el estudiante sea capaz de demostrar la adquisición de las competencias CB12, CA03, CA04, CA05, y CE05.

#### 4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

El estudiante durante su estancia trabajará supervisado por un profesor o investigador del centro en el extranjero, quien realizará un informe final sobre el trabajo realizado durante la estancia y el rendimiento del estudiante. Dicho informe reflejará no sólo las actividades de investigación, sino cualquier otra actividad formativa realizada durante la misma (asistencia o impartición de seminarios, asistencia a cursos especializados ...), así como la formación recibida por el estudiante en técnicas específicas.

Previa a la realización de la estancia la comisión académica será informada de los detalles de la misma y autorizará su realización.

El tutor incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando ese informe junto a una valoración personal del resultado de la estancia. Toda la documentación relevante se remitirá a la comisión académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando.

#### 4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

Esta actividad implica movilidad de al menos tres meses en un centro de investigación extranjero.

#### ACTIVIDAD: Formación Transversal

##### 4.1.1 DATOS BÁSICOS

##### Nº DE HORAS

30

##### DESCRIPCIÓN

La formación transversal se puede recibir de dos maneras:

1. Con la asistencia a la reunión anual del doctorado, en donde al menos media jornada estará dedicada a cursos donde se desarrollen competencias transversales y competencias transferibles a la industria.
2. Con la asistencia a cursos creados e impartidos localmente.

Es recomendable que los contenidos de estos cursos incluyan aspectos como por ejemplo: organización de proyectos, gestión de calidad, transferencia de conocimientos, comunicación de la ciencia, oportunidades para emprendedores, redacción de artículos científicos, evaluación de la actividad investigadora en Ciencias, RefWorks 2.0, convocatorias de ayuda a la investigación, entre otros.

Tanto para estudiantes a tiempo completo como parcial esta actividad no tendrá carácter obligatorio a no ser que alguna de nuestras Universidades así lo requiera.

Esta actividad servirá para desarrollar las competencias CB14, CB15 y CB16.

#### 4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

El tutor incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de cursos de formación transversal realizados por el candidato a doctor. Este documento se remitirá a la comisión académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando.

#### 4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

Siempre que no se opte por los cursos impartidos en la propia universidad (si los hay), la actividad requerirá movilidad, por ejemplo, la asistencia a los workshops requerirá movilidad, en la mayoría de los casos los workshops se organizarán de forma rotativa en distintas sedes del doctorado o en las dependencias de instituciones y empresas que colaboran con el mismo.

### 5. ORGANIZACIÓN DEL PROGRAMA

#### 5.1 SUPERVISIÓN DE TESIS

Relación de actividades previstas para fomentar la dirección de tesis doctorales:

Las distintas universidades participantes contabilizarán como actividad docente el tiempo dedicado a la dirección y tutorización de tesis. Aunque cada Universidad tiene su normativa propia, en todas ellas se fomentará y valorará la dirección de tesis doctorales y las labores de tutorización.

Relación de actividades previstas que fomenten la supervisión múltiple en casos justificados académicamente (co-dirección de tesis por parte de un director experimentado y un director novel, co-tutela de tesis interdisciplinares, en colaboración, internacional, etc.) y presencia de expertos internacionales en las comisiones de seguimiento, informes previos y en los tribunales de tesis:

Una parte significativa de los doctorandos que recibe este programa han realizado previamente el máster en "Theoretical Chemistry and Computational Modelling" (master Erasmus Mundus) o el máster en "Química Teórica y Modelización Computacional", cuyo segundo año tiene un fuerte carácter internacional, con un curso intensivo común con otras 46 instituciones europeas de 8 países distintos y en el que el estudiante tiene que realizar necesariamente una estancia de investigación de al menos 3 meses en una universidad no española. Este marcado carácter internacional del máster hace que se fomente de forma muy activa la colaboración entre Universidades Europeas, por lo que es frecuente la codirección de tesis entre una universidad española y una extranjera.

Desde la comisión académica del doctorado se fomentará que la mayor parte de las tesis presentadas en el programa de doctorado tengan la mención internacional, lo que implicará, la realización de al menos una estancia de mínimo 3 meses de duración en un centro de investigación extranjero, que la tesis sea informada previamente por dos expertos doctores de instituciones de educación superior o de investigación no españolas y que al menos un miembro del tribunal evaluador de la tesis también lo sea. Se marca como objetivo que el porcentaje de tesis que obtengan la mención internacional sea superior al 75% del total de tesis defendidas. Este porcentaje está basado en el historial previo de tesis que alcanzaron la mención europea en el programa de doctorado anterior.

Se fomentará la codirección entre un director experimentado y un director novel a fin de formar en la labor de dirección de jóvenes doctores. Para ello se tiene prevista entre otras actividades una reunión anual de directores en donde se intercambiará impresiones y experiencias en dicha labor.

Dado el carácter internacional del doctorado existe un comité internacional encargado de la coordinación entre países, la realización de actividades conjuntas (como los workshops internacionales y cursos de especialización), fomentar la colaboración entre grupos de distintos países y codirección de tesis y velar para que el doctorado cumpla las normas de calidad exigibles a un doctorado internacional, en particular por implementar las normas de calidad exigidas por la ECTNA (European Chemistry Thematic Network) y la normativa del programa Erasmus Mundus.

Guía de buenas prácticas para la dirección de tesis doctorales.

El programa de doctorado cumplirá el código de buenas prácticas adoptado por las Escuelas Doctorales a las que esté inscrito. De acuerdo con el Real Decreto 99/2011, de 28 de enero.

El programas de doctorado tendrá su propia guía de buenas prácticas que será aprobado por la Comisión Académica en un plazo máximo de tres meses a partir de la aprobación de la memoria de verificación y será revisado cada dos años. Esta guía estará a disposición de todos los participantes (estudiantes y profesores) del programa para su consulta y cumplimiento.

## 5.2 SEGUIMIENTO DEL DOCTORANDO

### **Procedimiento utilizado por la correspondiente Comisión Académica responsable del programa de doctorado para la asignación del tutor y del director de tesis del doctorando:**

Una vez admitido un estudiante en el programa de doctorado, a la vista de la documentación aportado, en especial su CV y proyecto en el que va a trabajar y si dicho proyecto está asociado a alguna beca de investigación. La comisión académica del máster asignará a cada doctorando:

- Un tutor en el momento de la admisión al programa de doctorado, que será un doctor con acreditada experiencia investigadora.

- Un director de tesis doctoral. Idealmente la asignación se realizará en el momento de la admisión y como máximo en un plazo de seis meses desde su matriculación. El director de tesis doctoral podrá ser coincidente o no con el tutor. El director será un doctor español o extranjero con acreditada experiencia investigadora. La tesis podrá ser codirigida por otros doctores cuando concurren razones de índole académico, como puede ser el caso de la interdisciplinariedad temática o los programas desarrollados en colaboración nacional o internacional. En el caso de tesis codirigidas la comisión académica aprobará la codirección y nombrará a los directores de la tesis. Una tesis doctoral podrá ser dirigida como máximo por dos doctores.

Las universidades establecerán las funciones de supervisión de los doctorandos mediante un compromiso documental firmado por la universidad, el doctorando, su tutor y su director en la forma que se establezca. Este compromiso será rubricado a la mayor brevedad posible después de la admisión y habrá de incluir un procedimiento de resolución de conflictos y contemplar los aspectos relativos a los derechos de propiedad intelectual o industrial que puedan generarse en el ámbito de programas de doctorado.

La Comisión Académica, oído doctorado, podrá modificar el tutor o el director de tesis de un doctorando en cualquier momento del periodo de realización del doctorado, siempre que ocurran razones justificadas tales como:

- Si el doctorando no está contento con la labor realizada por el director hablará lo antes posible con el director para tratar de solucionar el problema. Si no se resuelve, el alumno deberá hablar con el coordinador del programa de doctorado para expresarle las quejas que tiene sobre su director y este asunto será tratado por la Comisión Académica del doctorado.
- Si alguna de las partes firmantes incumple el documento que establece las funciones de supervisión de los doctorandos o algún convenio de confidencialidad elaborado entre director y doctorando.

### **Procedimiento utilizado para el control del registro de actividades de cada doctorando y la certificación de sus datos:**

Todas las actividades del doctorando se registrarán en un documento individualizado (Documento de Actividades del Doctorando), que será revisado regularmente por el director y tutor de la tesis. El tutor remitirá dicho documento a la Comisión Académica al menos una vez al año.

A partir de la admisión de un estudiante nuevo al programa de doctorado se abrirá, por parte de los servicios de coordinación académica del doctorado, un expediente personalizado (registro de actividades del doctorando) donde se recopilarán:

- La documentación aportada por el estudiante para el ingreso en el doctorado.
- El plan de investigación.

- Copia de todas las resoluciones emitidas por la Comisión Académica que afecten al doctorando (por ejemplo asignación de tutor, director de tesis o modificación de los mismos).
- El convenio de cotutela en el caso de tesis codirigidas entre dos instituciones.
- Información sobre ayudas y becas recibidas para la realización de la tesis doctoral.
- El Documento de Actividades del Doctorando que recogerá todos los informes emitidos por el tutor donde se recogerán todas las actividades formativas realizadas por el doctorando en cada periodo y los justificantes de las mismas.
- En el caso de tesis cotuteladas entre dos instituciones del mismo o diferentes países, el Documento de Actividades del Doctorando recogerá de forma detallada el tiempo que el estudiante pasa en cada una de las instituciones.

#### **Procedimiento para la valoración anual del Plan de investigación y el registro de actividades del doctorando:**

La Comisión Académica evaluará cada curso académico el plan de investigación y el Documento de Actividades del Doctorando. La evaluación positiva será un requisito imprescindible para continuar en el programa. En caso de evaluación negativa, que debe ser debidamente motivada, el doctorando deberá ser evaluado de nuevo en un plazo máximo de seis meses a cuyo efecto elaborará un nuevo plan de investigación. Si se produjese una segunda evaluación negativa el doctorando causará baja definitiva en el programa.

En la evaluación anual de las actividades realizadas por estudiantes a tiempo parcial se tendrá en cuenta las condiciones especiales que concurren en dichos estudiantes en cuanto a disponibilidad de tiempos y horarios para realizar determinadas actividades.

La Comisión Académica evaluará el plan de investigación basándose al menos en la metodología a utilizar y los objetivos a alcanzar, así como los medios y la planificación temporal para lograrlo.

El plan puede ser modificado y debe estar avalado por el tutor y el director. El documento de actividades del doctorando debe ser revisado regularmente por el tutor y el director de tesis.

#### **Previsión de las estancias de los doctorandos en otros centros, nacionales e internacionales, cotutelas y menciones europeas:**



La realización de estancias nacionales e internacionales por el doctorando deberán estar estrictamente dirigidas a la realización de la tesis doctoral. Se deberá contar con la autorización del director para la realización de las mismas. La evaluación de los resultados específicos de dicha estancia será llevada a cabo por el director y se reflejará en el documento de actividades del doctorando.

Los convenios de co-tutelados deberán seguir el procedimiento establecido por cada una de las universidades implicadas en el programa.

### 5.3 NORMATIVA PARA LA PRESENTACIÓN Y LECTURA DE TESIS DOCTORALES

Las Universidades contemplan en los vínculos siguientes los procedimientos relativos al tribunal, defensa y evaluación de tesis doctoral:

#### **Universidad Autónoma de Madrid**

<http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1242652450791/contenidoFinal/Procedimientos.htm>

#### **Universidad de Barcelona**

<http://www.ub.edu/acad/es/doctorado/normativa/tesisEEES.pdf>

#### **Universidad de Cantabria**

<http://www.unican.es/NR/rdonlyres/FF20E609-DC74-40A9-9B6B-97BDE14133BC/72790/NormativadeEstudiosdeDoctoradodelaUCCG122012.pdf>

#### **Universidad Complutense**

<http://www.ucm.es/cont/descargas/documento18900.pdf>

#### **Universidad de Extremadura**

[http://www.unex.es/organizacion/servicios/servicio\\_becas/funciones/tercer\\_ciclo/normas-operativas-o-de-procedimiento-para-el-tramite-de-tesis-doctorales](http://www.unex.es/organizacion/servicios/servicio_becas/funciones/tercer_ciclo/normas-operativas-o-de-procedimiento-para-el-tramite-de-tesis-doctorales)

#### **Universidad de las Illes Balears**

<http://postgrau.uib.cat/doctorat/tesis/Procediments/>

#### **Universidad Jaume I de Castellón**

<http://www.uji.es/bin/infoest/estudis/doctorat/nts1393e.pdf>

#### **Universidad de Murcia**

<https://sede.um.es/sede/normativa/um/normas-academicas/reglam-doctorado-2012-BORM.pdf>

#### **Universidad de Oviedo**

<http://cei.uniovi.es/postgrado/doctorado/tesisdoctoral>

#### **Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea**

[http://www.ikasketak.ehu.es/p266-shtesdct/es/contenidos/informacion/matricula\\_tesis/es\\_matr\\_def/matricula\\_defensa\\_tesis\\_doctoral.html](http://www.ikasketak.ehu.es/p266-shtesdct/es/contenidos/informacion/matricula_tesis/es_matr_def/matricula_defensa_tesis_doctoral.html)

### **Universidad de Sevilla**

<http://www.doctorado.us.es/web/guest/ct-normativa-tesis>

### **Universidad de Valencia**

<http://www.uv.es/fatwirepub/userfiles/file/deposito.pdf>

### **Universidad de Vigo**

[http://webs.uvigo.es/vieprof/images/documentos/normativas/Uvigo/modificacion\\_reglamento\\_estudios\\_posgrao2.pdf](http://webs.uvigo.es/vieprof/images/documentos/normativas/Uvigo/modificacion_reglamento_estudios_posgrao2.pdf)

En términos generales podemos decir que:

La tesis doctoral consistirá en un trabajo original de investigación elaborado por el candidato y relacionado con la Química Teórica o la Modelización Computacional.

La tesis doctoral se evaluará en el acto de defensa que tendrá lugar en sesión pública y consistirá en la exposición y defensa por el doctorando del trabajo de investigación elaborado ante los miembros del tribunal. La tesis podrá ser desarrollada y, en su caso, defendida, en los idiomas habituales para la comunicación científica en Química.

El tribunal que evalúe la tesis doctoral se compondrá de acuerdo con los requisitos fijados por cada Universidad.

La defensa de la tesis ha de ser evaluada en la universidad española en la que el doctorando esté matriculado. En el caso de programas tesis tuteladas entre dos universidades la defensa de la tesis se realizará en una de las dos universidades en los términos que se acuerden en el correspondiente convenio de colaboración.

La universidad en la que se defienda la tesis garantizará la publicidad de la tesis doctoral finalizada a fin de que durante el proceso de evaluación, y con carácter previo al acto de defensa, otros doctores puedan remitir observaciones sobre su contenido.

El tribunal que evalúe la tesis dispondrá del documento de actividades del doctorando, con las actividades formativas llevadas a cabo por el doctorando. Este documento de seguimiento no dará lugar a una puntuación cuantitativa pero sí constituirá un instrumento de evaluación cualitativa que complementará la evaluación de la tesis doctoral.

El tribunal emitirá un informe y la calificación global concedida a la tesis en términos de «apto» o «no apto». El tribunal podrá proponer que la tesis obtenga la mención de «cum laude» si se emite en tal sentido el voto secreto positivo por unanimidad. A tal efecto, se cerrará la sesión pública y cada miembro del tribunal entregará al Presidente un sobre cerrado con su voto en relación a este aspecto. Posteriormente, se abrirá una nueva sesión pública para proceder al escrutinio de los votos y comprobar si procede la propuesta de la mención “cum laude”.

La totalidad de los miembros que integren el tribunal deberán estar en posesión del título de Doctor y contar con experiencia investigadora acreditada. El tribunal estará formado por una mayoría de miembros externos a la Universidad donde se ha desarrollado el trabajo.

Una vez aprobada la tesis doctoral, la universidad se ocupará de su archivo en formato electrónico abierto en un repositorio institucional y remitirá, en formato electrónico, un ejemplar de la misma así como toda la información complementaria que fuera necesaria al Ministerio de Educación a los efectos oportunos. Se remitirá una copia de la tesis doctoral y del acta de con la calificación a la comisión académica que guardará una copia en el expediente del doctorando.

En circunstancias excepcionales determinadas por la comisión académica del programa, como pueden ser, entre otras, la participación de empresas en el programa, la existencia de convenios de confidencialidad con empresas o la posibilidad de generación de patentes que recaigan sobre el contenido de la tesis, se podrá realizar parte o la totalidad de la defensa en sesión cerrada y se podrá omitir en la copia remitida a las universidades y la comisión académica los datos sujetos a confidencialidad.

El título de Doctor o Doctora podrá incluir en su anverso la mención «Doctor internacional», siempre que:

- Durante el periodo de formación necesario para la obtención del título de doctor, el doctorando haya realizado una estancia mínima de tres meses fuera de España en una institución de enseñanza superior o centro de investigación de prestigio, cursando estudios o realizando trabajos de investigación. La estancia y las actividades deben haber sido avaladas por el director, autorizadas por la Comisión Académica, y recogidas en el documento de actividades del doctorando.
- Parte de la tesis doctoral, al menos el resumen y las conclusiones, se haya redactado y sea presentado en una de las lenguas habituales para la comunicación científica en su campo de conocimiento, distinta a cualquiera de las lenguas oficiales en España. Esta norma no será de aplicación cuando las estancias, informes y expertos procedan de un país de habla hispana.
- Que la tesis haya sido informada por un mínimo de dos expertos doctores pertenecientes a alguna institución de educación superior o instituto de investigación no española.
- Que al menos un experto perteneciente a alguna institución de educación superior o centro de investigación no española, con el título de doctor, y distinto del responsable de la estancia., haya formado parte del tribunal evaluador de la tesis.

## 6. RECURSOS HUMANOS

### 6.1 LÍNEAS Y EQUIPOS DE INVESTIGACIÓN

Líneas de investigación:

NÚMERO	LÍNEA DE INVESTIGACIÓN
--------	------------------------

01	Reacciones ión-molécula en fase gas.
02	Modelización de reacciones en superficies y de sistemas fotovoltaicos.
03	Dinámica de fragmentación de clusters y moléculas.
04	Ionización y disociación de moléculas por pulso láser ultracortos.
05	Estructura y espectroscopía de materiales dopados con impurezas de elementos pesados.
06	Dinámica Cuántica y Cuasiclásica de reacciones químicas y procesos de Fotodisociación..
07	Control Cuántico con Campos Ultraintensos y Dinámica de Attosegundo con Paquetes de Onda.
08	Simulaciones por ordenador de líquidos. Calculo de las propiedades del agua en fase solida.
09	Modelos simplificados para el estudio de la estructura y dinámica de proteínas
10	Estructura electrónica y reactividad del estado fundamental y de los estados excitados de moléculas orgánicas
11	Estudio teórico de cristales y superficies
12	Estudio teórico de biomoléculas. Reactividad química en enzimas. Diseño de fármacos y Bioinformática
13	Estudio teórico del magnetismo en cristales moleculares.
14	Modelización computacional y simulación de clusters iónicos y neutros de tamaño medio
15	Estudio teórico de la dinámica de reacciones atmosféricas y sistemas complejos
16	Bio-fisicoquímica de macromoléculas y coloides
17	Interacciones entre proteínas y docking
18	Inestabilidades Jahn#Teller y pseudo Jahn#Teller en materiales.
19	Desarrollo de métodos de simulación desde primeros principios. Propiedades de interfases entre óxidos
20	Evolución de estados excitados en disolución. Búsqueda y caracterización de intersecciones cónicas
21	Efecto de disolvente en la cinética y termodinámica de reacciones químicas y en el espectro de moléculas de interés biológico
22	Estudio de la inhibición de la formación de ALE (AdvancedLipoxidationEnd#products) y AGE (AdvancedGlycationEnd#products)
23	Estudios teóricos de reactividad química en medios condensados, disolución y proteínas. Desarrollos metodológicos de algoritmos híbridos QM/MM
24	Diseño de inhibidores enzimáticos y nuevos catalizadores biológicos
25	Estudio teórico de nanoestructuras
26	Estudio teórico de espectro vibracional de moléculas poliatómicas
27	Láseres y procesos fotoquímicos
28	Dinámica de estados excitados de moléculas en disolución
29	Química Organometálica Teórica

30	Simulación de Metaloproteasas de Matriz
31	Teoría del enlace químico en el espacio real.
32	Termodinámica y cinética de transiciones de fase en materiales Materia a alta presión
33	Incorporación de metales de transición en compuestos tipo-sandwich
34	Desarrollos en teoría del Funcional de Orbitales Naturales. Densidades electrónicas de par y densidades electrónicas
35	Biocompatibilidad de clusters semiconductores pasivados. Bases Moleculares de la Toxicología del Aluminio (III)
36	Estructura electrónica en puntos cuánticos
37	Explosiones de Coulomb en clusters inducidas por pulso de laser ultraintensos
38	Estudio teórico de sólidos, superficies y catálisis
39	Estructura Molecular y Reactividad. Aplicaciones a sistemas magnéticos y de valencia mixta con aplicaciones tecnológicas
40	Estudio teórico de la solvatación de metales
41	Química cuántica del estado excitado y fotobiología teórica
42	Simulación de procesos químicos en disoluciones y medios enzimáticos. Diseño y desarrollo de fármacos asistido por ordenador
43	Caracterización teórica de materiales moleculares electroactivos
44	Desarrollos metodológicos para cálculos de estructura electrónica y modelado molecular.
45	Desarrollo de métodos de alta precisión y de análisis de la estructura electrónica en Química Cuántica
46	Estudio teórico de interacciones moleculares y reacciones químicas de interés astrofísico, atmosférico y biológico.

**Equipos de investigación:**

**Descripción de los equipos de investigación y profesores, detallando la internacionalización del programa:**

Ver anexo

**6.2 MECANISMOS DE CÓMPUTO DE LA LABOR DE AUTORIZACIÓN Y DIRECCIÓN DE TESIS**

**Mecanismos de cómputo de la labor de autorización y dirección de tesis:**

Todas las universidades participantes en el programa de doctorado reconocen dentro de sus planes de organización docente la labor de dirección y tutorización de tesis doctorales, por ejemplo:

La **Universidad Autónoma de Madrid** contabiliza 75 horas al año por dirección de tesis y 10 horas por la tutorización dentro del plan de actividades del profesorado (PAP).

La **Universidad de Cantabria** contabiliza 30 horas durante cada uno de los dos cursos siguientes a la presentación de la tesis por dirección de la misma.

La **Universidad Complutense** contabiliza por dirección de 3 a 6 Trabajos Fin de Master 10 horas si son trabajos de 6 créditos ECTS, 20 horas si son de 7 a 12 ECTS, 30 horas si son de 13 a 18 o 40 horas si son 19 o más créditos 4, hasta un máximo de 40 horas . Co tutela de prácticas externas en grupos de 6 a 12 estudiantes, o más si así lo señala la memoria verificada, que contabiliza como 5 horas si son de 6

créditos y como 10 horas si son de 12 o más créditos. En cualquier caso, la suma de la dedicación a estas labores de dirección de trabajos fin de Grado o fin de Máster y de co-tutela de prácticas no puede superar las 45 horas.

La **Universidad de Oviedo** da una exención de 10 horas al año por la dirección de dos tesis en los cinco últimos años y por la tutorización de dos o más trabajos fin de máster.

En la **Universidad de Valencia** este mecanismo se establecerá en el Reglamento General de Dedicación Docente del Profesorado, pendiente de elaboración o actualización en su caso.

La **Universidad de Vigo** contabiliza 3 créditos (30 horas) de docencia por cada tesis en doctorado dirigida. Se contabiliza el promedio de las tesis leídas en los tres cursos académicos inmediatamente anteriores al de la presentación de la solicitud de exención. En el caso de que haya más de un director de tesis se dividirá por el número de codirectores. Esta exención docente se computará a efectos de personal no consolidable. Cada profesor podrá como máximo tener una exención de 60 horas por este apartado.

## 7. RECURSOS MATERIALES Y SERVICIOS

El Doctorado en “Química Teórica y Modelización Computacional” cuenta para su desarrollo con las instalaciones de los Departamentos y Facultades en los que se ubican los grupos participantes en el mismo.

Para el desarrollo de las actividades del doctorado se cuenta con recursos materiales tales como:

- Aulas de propósito general dotadas con: pizarras, ordenador, video proyector y conexión física a internet.
- Para la realización de seminarios entre distintas universidades el programa cuenta con un aula virtual ([https://uam.adobeconnect.com/\\_a905201578/etcem/](https://uam.adobeconnect.com/_a905201578/etcem/)) que permite la realización de clases y conferencias en línea si como la creación de grupos de trabajo entre estudiantes. Además cuenta con una página web en moodle dedicada en exclusiva a actividades del doctorado (<https://moodle.uam.es/course/category.php?id=1372>).
- Aulas de informática para actividades docentes relacionadas con el doctorado:
  - En la universidad coordinadora (UAM) se cuenta con un aula de simulación asociada al Centro de Computación Científica (<https://www.ccc.uam.es/>) que cuenta con software informático específico (principales programas de simulación y visualización en química y física), posibilidad de acceso remoto, sistema de ejecución de trabajos en colas, acceso a ordenadores de mayor potencia en las instalaciones del Centro de Computación Científica. Ese aula se usa presencial o remotamente en los cursos asociados al doctorado.
  - En el resto de universidades asociadas se cuenta con aulas de informática y máquinas de cálculo con acceso a los principales programas
- Todos los estudiantes del programa de doctorado tienen acceso a revistas electrónicas a través de la base “web of knowledge” del FECYT.
- En su esfuerzo por garantizar la accesibilidad de aquellas personas con discapacidad, las universidades cuentan además con: rampas de acceso, baños y servicios adaptados, plazas de parking reservadas y red inalámbrica accesible. De hecho en el doctorado ya se tiene experiencia con casos extremos como es el de un estudiante con ceguera total, que realizó el periodo formativo (master) en el programa y está

actualmente finalizando el doctorado. La experiencia con este estudiante ha supuesto la adaptación de los medios informáticos a estudiantes con dificultades visuales.

- En cuanto a bibliotecas, cada universidad dispone bibliotecas bien equipadas con un amplio número de revistas y libros. Por ejemplo, la biblioteca de la facultad de ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid (<http://biblioteca.uam.es/ciencias/presentacion.html>) dispone de: más de 6000 títulos de revistas electrónicas, 67 bases de datos y 29 series de Springer en libros electrónicos. Su

fondo bibliográfico está formado por 86000 ejemplares de monografías, 47000 ejemplares en libre acceso, 1700 títulos de revistas en papel, 459 títulos de revistas en papel en curso, 5200 títulos de tesis doctorales inéditas, 2560 en microfichas. En cuanto a su infraestructura, cuenta con 637 puestos de lectura en Biblioteca, 213 puestos de lectura en Hemeroteca, 290 puestos de estudio en la Sala 24 horas, 1 puesto de consulta para personas con discapacidad, 18 puestos de lectura en CDEN, 20 puestos en Aula Multimedia, 10 salas de trabajo en grupo (60 puestos), 1 sala de investigadores: (6 puestos), 27 terminales para consulta y 35 ordenadores portátiles para préstamo. Esta biblioteca ofrece también servicios de formación de usuarios en técnicas de búsqueda bibliográfica, tanto a nivel inicial para todos los estudiantes que acceden por primera vez a la titulación como a los de máster y doctorado.

Todos los estudiantes del programa doctorado para realizar su labor de investigación dispone de:

- Un puesto de trabajo en su universidad dotadas con mobiliario, computador personal con software generales y específicos, teléfono y conexión a internet.

- Acceso a recursos de cálculo a diferentes niveles:

- Clusters de cálculo de los grupos de investigación donde realizan su doctorado. Estos ordenadores aseguran el tiempo de cálculo y recursos necesarios para hacer la tesis doctoral.
- Acceso a la Red Española de Supercomputación a través de proyectos liderados por los investigadores de los distintos grupos de investigación.
- Acceso a recursos computacionales a través de centros locales o autonómico. Como ejemplo tenemos: Centro de Computación Científica en la Universidad Autónoma de Madrid (<https://www.ccc.uam.es>), ICMol Computing Center en la Universidad de Valencia (<http://www.uv.es/uiqt>), Clúster de Modelización Científica de los Servicios Científico Técnico en la Universidad de Oviedo (<http://cms.uniovi.es>), el Centro de Supercomputación de Galicia (<http://www.cesga.es/>) o el Supercomputador Altamira y la instalación Calderon en Cantabria, el primero forma parte de la Red Española de Supercomputación

- El Software necesario para realizar su tesis doctoral

Las universidades que pertenecen al convenio disponen también de servicios para el bienestar de sus estudiantes tales como: alojamientos universitarios, cafeterías y comedores, agencia de viajes, museos, oficina de actividades culturales, servicio de educación física y deportes, servicio de salud laboral y prevención de riesgos laborales, oficina de acción solidaria, unidad de igualdad, oficina de acogida del alumnado, oficina de apoyo a estudiantes extranjeros, servicios de inserción laboral y búsqueda de empleo, etc.

- Ayudas externas para asistencia a congresos y estancias en el extranjero:

Como se ha planteado el programa de doctorado, el candidato a doctor requiere asistir a un amplio número de eventos que apoyen su formación. La participación en estas actividades y estancias se realizarán siempre sin coste adicional para el estudiante.

En el caso de estancias cortas el estudiante dispone siempre de un sobresueldo que le permite afrontar los gastos adicionales que supone la estancia (alojamiento, viaje, manutención...). Las vías que se utilizan para financiar estas estancias son:

- Ayudas de movilidad asociadas a la beca o contrato del estudiante tanto en el caso de programas del ministerio (FPI o FPU), programas financiados por las Comunidades Autónomas, por la Unión Europea (becas Marie-Curie, Initial Training Networks...) o los programas de becas propias de las universidades. Todos estos programas contemplan ayudas complementarias de movilidad, en general de 3 meses al año.
- Ayudas de movilidad específicas del ministerio de educación para estudiantes de doctorado en el caso de estudiantes que no tengan alguna beca o contrato de los mencionados anteriormente.
- Programas de intercambio de estudiantes a nivel europeo. En particular se han utilizado frecuentemente ayudas asociadas a proyectos transnacionales en los que participan los investigadores: acciones COST, acciones integradas entre España y países europeos y ayudas de movilidad asociadas a los centros de supercomputación europeos (High Performance Computing - Europa, HPC-Europa).
- Ayudas específicas de fundaciones o acuerdos con empresas. El programa de doctorado ha establecido acuerdos con compañías de supercomputación como Bull, IBM o Fujitsu y colabora con asociaciones como la APQTC (Asociación para la Promoción de la Química Teórica y Computacional) que oferta ayudas de movilidad.

En los años de vigencia del programa de doctorado del cuál deriva esta propuesta el 100% de las acciones de movilidad de estancias cortas (hasta 3 meses) se han financiando por alguna de esas vías.

En el caso de asistencia a congresos y reuniones científicas se cuenta además con otras vías de financiación como son las bolsas de viaje que otorgan las universidades a los estudiantes (en general cubren los gastos de viaje de un congreso al año) y los fondos propios de los grupos de investigación a través de los proyectos propios, que contemplan siempre financiación para asistencia a congresos. Por esa vía se cubren los gastos de inscripción y los gastos de viaje y asistencia a algunos congresos. De



nuevo la política del programa de doctorado es que los gastos de asistencia a congresos sean totalmente cubiertos y no supongan un coste para los estudiantes.

En el caso de asistencia a cursos de formación específicos, como los organizados por el Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular (CECAM), la movilidad se financia mediante ayudas específicas del CECAM.

El workshop anual que reúne a todos los estudiantes de doctorado del programa se financia con fondos propios obtenidos a través de acuerdos con empresas y con el dinero de los grupos de investigación. La asistencia a estos workshops no tiene ningún coste para los estudiantes.

## 8. REVISIÓN, MEJORA Y RESULTADOS DEL PROGRAMA

### 8.1 SISTEMA DE GARANTÍA DE CALIDAD Y ESTIMACIÓN DE VALORES CUANTITATIVOS

#### SISTEMA DE GARANTÍA DE CALIDAD

#### **Comisión Académica del programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling.**

La **Comisión Académica del Programa de Doctorado** estará compuesta por un profesor de cada una de las universidades participantes (Coordinadores Locales) y realizará las tareas de coordinación entre las universidades. Además, de esta comisión dependerá la admisión de estudiantes, la evaluación anual del documento de actividades y el plan de investigación del doctorando; la autorización de estudios de doctorado a tiempo parcial, bajas temporales del programa, codirecciones, estancias y actividades a los doctorandos; la asignación de tutores, directores y codirectores; y, la realización de todas aquellas otras funciones que estén descritas en el programa de verificación por la ANECA. La Comisión Académica se reunirá presencialmente al menos una vez al año y de mediante la plataforma de reuniones virtuales disponible en el programa de doctorado ([https://uam.adobeconnect.com/\\_a905201578/etccm/](https://uam.adobeconnect.com/_a905201578/etccm/)) tantas veces como sea necesario. Además se mantendrá una comunicación fluida a través de una lista de correo en internet (tccm-coordinadores-l@uam.es). Los asuntos tratados y los acuerdos obtenidos en dichas reuniones, tanto presenciales, como virtuales, serán recogidos en las correspondientes actas. Las decisiones y acuerdos realizados por razones de operatividad a través de la lista de correo se verán reflejadas en el acta de la reunión siguiente.

#### **Coordinador del Programa de Doctorado y Coordinadores Locales:**

Los Coordinadores Locales son elegidos por acuerdo en cada Universidad, entre los profesores de la misma. El Coordinador del Programa de Doctorado se elige en la reunión anual de Coordinadores Locales que tiene lugar antes de la planificación de cada curso académico. El Coordinador del Programa de Doctorado actúa como Presidente de la Comisión Académica. La Universidad del presidente actúa como Coordinadora del Programa de Doctorado Interuniversitario. En los procedimientos generales de desarrollo del Programa se siguen los acuerdos firmados en el correspondiente convenio por los Rectores de todas las Universidades participantes.

#### **Sistema de Garantía Interna de Calidad.**

Las Universidades participantes aceptan seguir un único Sistema de Garantía de Calidad, siempre que no haya incompatibilidad con los sistemas implementados en las Universidades participantes. Se seguirá el Sistema de Garantía Interna de Calidad (SGIC) de los Programas de Doctorado de la Universidad Autónoma de Madrid. La información sobre el mismo estará siempre disponible en la web. Actualmente se puede encontrar en el siguiente enlace:

[http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1234888218717/sinContenido/Sistema\\_de\\_Garantia\\_de\\_Calidad.htm](http://www.uam.es/ss/Satellite/Ciencias/es/1234888218717/sinContenido/Sistema_de_Garantia_de_Calidad.htm)

El Sistema de Garantía de Calidad contiene información relativa a los siguientes aspectos:

- El órgano, unidad o persona/s responsable/s de gestionar, coordinar y realizar el seguimiento del Sistema de Garantía Interno
- Los mecanismos y procedimientos de seguimiento que permite supervisar el desarrollo del programa de doctorado.
- Los procedimientos que aseguran el correcto desarrollo de los programas de movilidad
- Los mecanismos del sistema de garantía de calidad que aseguran la transparencia

En este último apartado, se contempla el modo por el cual la Universidad Autónoma de Madrid hace pública la información actualizada relativa a todos los programas de doctorado que imparte, para el conocimiento de sus grupos de interés. Independientemente de este canal de divulgación, el programa publicará anualmente su informe de actividades en la página web del doctorado.

Mecanismos y procedimientos que aseguren la coordinación entre las universidades participantes. Dada su naturaleza interuniversitaria, este programa cuenta con una Comisión Interna de Calidad nombrada por la Comisión Académica, dicha comisión estará compuesta por 3 profesores de 3 universidades distintas, un representante del personal de administración del programa y un representante de los estudiantes. La principal función de la Comisión Interna de Calidad es la de colaborar con el Coordinador del programa en todas las funciones que se deriven del SGIC, entre ellas:

- Ser responsable de cumplir el sistema de garantía de calidad y proponer modificaciones al mismo.
- Realizar encuestas de satisfacción de los estudiantes y profesores con una periodicidad anual y recoger los resultados de las encuestas que se puedan hacer de forma independiente en cada una de las universidades. Estas encuestas se realizarán por internet a través de la página de moodle: <https://moodle.uam.es/course/category.php?id=1372>
- Analizar dichas encuestas de satisfacción y a partir de dichos análisis realizar propuestas de mejora a la Comisión Académica.
- Recibir, analizar y contestar a cualquier queja o reclamación por parte de los estudiantes del programa del doctorado, proponiendo a quién corresponda las medidas para resolver esos problemas.
- Analizar los resultados de los programas de movilidad, en particular los informes emitidos después de cada estancia y los posibles problemas asociados a los mismos.
- Realizar anualmente un informe que recoja los datos fundamentales del programa (número de estudiantes de nuevo ingreso, estudiantes activos en cada año, número de tesis leídas, actividades realizadas, etc), el seguimiento de los estudiantes egresados en los últimos tres años, los resultados de las encuestas de satisfacción, las propuestas de mejora y un análisis crítico del programa. Dicho informe será aprobado por la Comisión Académica y estará disponible para todas las personas e instituciones implicadas en el doctorado a través de la página web del programa de doctorado.

El responsable actual de la Comisión Interna de Calidad del programa es el profesor Angel Martín Pendás de la Universidad de Oviedo. Además, el programa de doctorado cuenta con personal de gestión propio que realizará las siguientes tareas:

- Velar por que toda la información de programa esté disponible para los estudiantes a través de la página propia del programa (<http://www.emtccm.org/tccm-jd>) y de las páginas de posgrado de las Universidades participantes.
- Dar publicidad a todas las ayudas de movilidad.
- Gestionar cualquier incidencia relacionadas con la movilidad de estudiantes.
- Realizar un seguimiento de los estudiantes durante su periodo de doctorado y posteriormente sobre su trayectoria laboral mediante la organización y coordinación de una asociación de alumni, que permitirá tener datos sobre la inserción laboral y la carrera científica posterior de los estudiantes egresados.
- Dar publicidad al informe anual del programa de doctorado

TASA DE GRADUACIÓN %	TASA DE ABANDONO %
97	3

TASA DE EFICIENCIA %
100

TASA	VALOR %
No existen datos	

#### JUSTIFICACIÓN DE LOS INDICADORES PROPUESTOS

La previsión de resultados se basa en las cinco últimas ediciones del programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional verificado positivamente en 2009 y con mención de excelencia en 2011, del cual deriva el doctorado aquí presentado. Debiéndose interpretar cada uno de los indicadores expuestos de acuerdo con las siguientes definiciones:

Tasa de graduación:

Porcentaje de estudiantes que finalizan la enseñanza en el tiempo previsto en el plan de estudios o en un año académico más en relación a su cohorte de entrada.

Tasa de abandono:

Relación porcentual entre el número total de estudiantes de una cohorte de nuevo ingreso que debieron obtener el título el año académico anterior y que no se han matriculado ni en ese año académico ni en el anterior.

Tasa de eficiencia:

Relación porcentual entre el número total de créditos teóricos del plan de estudios a los que debieron haberse matriculado a lo largo de sus estudios el conjunto de estudiantes graduados en un determinado curso académico y el número total de créditos en los que realmente han tenido que matricularse.

#### 8.2 PROCEDIMIENTO GENERAL PARA VALORAR EL PROCESO Y LOS RESULTADOS

**Procedimientos y mecanismos para realizar el seguimiento de los doctores egresados.**

La estructura de nuestro doctorado transferirá al candidato a doctor habilidades que le permitirán adaptarse fácilmente a diferentes medios productivos y les permitirá contactar con muchos grupos alrededor del mundo, a través de sus estancias de investigación y participación en workshops, congresos internacionales y los cursos especializados. Estos workshops serán también empleados para favorecer la interacción con representantes de empresas, principalmente con aquellas que tengan departamentos de modelización computacional, así como también con industrias que colaboren en proyectos con universidades del programa de doctorado o que tengan convenios de apoyo al programa.

Las distintas universidades participantes mantienen un contacto fluido con los egresados a través de las correspondientes asociaciones de antiguos alumnos (alumni). Además desde la coordinación y la gestión del programa de doctorado se creará una asociación de alumni propia del programa que permita hacer un seguimiento de los estudiantes egresados del doctorado y su trayectoria profesional una vez acabada la tesis doctoral.

Desde la gestión administrativa del programa de doctorado se realizan distintas acciones para promover la pertenencia a esa asociación y facilitar la recogida de datos. En particular, y como soporte a dicha asociación:

- Se ha creado una sección en la página web del programa de doctorado donde los estudiantes egresados pueden ir actualizando sus datos y su curriculum vitae. Desde la gestión del doctorado se solicitará una actualización de datos anualmente a todos los estudiantes egresados.
- Se tomarán acciones para fomentar los contactos entre los estudiantes egresados (grupos en redes sociales y listas de distribución de correo).
- Se realizará un boletín de noticias como medio eficiente de comunicación donde se difundirán noticias y actividades relacionadas con la Química Teórica de interés para egresados
- Se distribuirá información sobre ofertas de trabajos abiertos en empresas e instituciones académicas a nivel postdoctoral y relacionados con el perfil de los egresados.
- Se realizarán anualmente encuestas dirigidas a los egresados sobre su empleabilidad y utilidad de los estudios de doctorado en su desarrollo profesional.

A partir de los datos recogidos en esa página web, y empleando la información de egresados con un tiempo entre 12 y 18 meses de haber obtenido el título de doctor, se incluirá en el informe anual de los resultados un apartado en términos de inserción laboral y satisfacción con la formación. Dicho informe será trasladado a las Comisión Interna de Calidad que propondrá acciones de mejora a la Comisión Académica del programa de doctorado.

En la actualidad no se dispone de los datos completos de seguimiento de los estudiantes del programa de doctorado vigente, pero se han analizado los datos presentados en la mención hacia la excelencia para aportar la siguiente información:

De los 96 estudiantes totales del programa de doctorado que leyeron la tesis entre los años 2004 y 2010 se han analizado la trayectoria profesional de los 23 que la realizaron en la Universidad coordinadora (UAM). De ellos 18 (78%) realizaron estancias postdoctorales al acabar la tesis (16 de ellos en el extranjero), 4 (17%) encontraron trabajo en empresas o instituciones españolas (2 en centros relacionados con la Universidad pero no en tareas de investigación) y una regresó a su país de origen, México y no se dispone de su información laboral. De los 18 que optaron por realizar una estancias postdoctoral 8 siguen realizándola, 6 se reintegraron al sistema español de I+D+i en diversos puestos (contratos Juan de la Cierva, Ramon y Cajal o contratos con las universidades) y 4 se integraron a su vuelta a España a diversas empresas. Ninguno se encuentra en el paro.

Basándonos en esta información podemos establecer:

**1. La previsión del porcentaje de doctorandos que consiguen ayudas para contratos post-doctorales.**

Aproximadamente el 78% de nuestros egresados consiguen contratos post-doctorales.

**2. Los datos relativos a la empleabilidad de los doctorandos.**

El 95% de nuestros egresados consiguen empleo en empresas o en contratos post-doctorales.

8.3 DATOS RELATIVOS A LOS RESULTADOS DE LOS ÚLTIMOS 5 AÑOS Y PREVISIÓN DE RESULTADOS DEL PROGRAMA	
TASA DE ÉXITO (3 AÑOS)%	TASA DE ÉXITO (4 AÑOS)%
65	20
TASA	VALOR %
No existen datos	

**DATOS RELATIVOS A LOS RESULTADOS DE LOS ÚLTIMOS 5 AÑOS Y PREVISIÓN DE RESULTADOS DEL PROGRAMA**

Utilizando los datos presentados en la mención hacia la excelencia en el que se incluía la fecha de presentación del proyecto de tesis y la lectura de la misma. De las 96 tesis leídas en el programa de doctorado entre los años 2004 y 2010 46 (48%) se leyeron el 3 años, 38 (39.5%) en 4 años y 12 (12.5%) requirieron más de 4 años. En ese periodo la tasa de abandono (tesis registradas por estudiantes que abandonaron el programa) fue inferior al 8%. Hay que tener en cuenta que en esta estadística se han contabilizados tesis realizados bajo un sistema que permitía estar 4 años realizando la tesis y muchos de los estudiantes contaban con becas de 4 años para la realización de la misma. Muchos de los estudiantes que necesitaron más de 4 años eran estudiantes que no trabajan a tiempo completo en la realización de la misma.

La estimación es que en el sistema actual, y sobre tesis finalizadas, un 65 % de los estudiantes realizarán la tesis en 3 años, un 20 % requerirá un 4º año extra (acumulativamente un 85% se leerán en un máximo de 4 años) y un 15 % serán estudiantes a tiempo parcial que requerirán un tiempo entre 4 y 6 años. Para esta estimación se ha teniendo en cuenta que la inscripción en el doctorado se realizará al haber completado al menos 60 ECTS (un año) del master que constituye en periodo formativo del programa de doctorado. La tasa de abandono prevista (estudiantes que se matriculan y no llegan a presentar nunca la tesis) en el programa de doctorado se estima que será inferior al 10%.

## 9. PERSONAS ASOCIADAS A LA SOLICITUD

9.1 RESPONSABLE DEL PROGRAMA DE DOCTORADO			
NIF	NOMBRE	PRIMER APELLIDO	SEGUNDO APELLIDO
50308944D	Isabel	Castro	Parga
DOMICILIO	CÓDIGO POSTAL	PROVINCIA	MUNICIPIO
C/ Darwin, 2. Módulo C / Despacho 210. Campus de Cantoblanco.	28049	Madrid	Madrid
EMAIL	MÓVIL	FAX	CARGO
decana.ciencias@uam.es		914978001	Decana de la Facultad de Ciencias de la UAM
9.2 REPRESENTANTE LEGAL			
NIF	NOMBRE	PRIMER APELLIDO	SEGUNDO APELLIDO
01082828B	José María	Sanz	Martinez
DOMICILIO	CÓDIGO POSTAL	PROVINCIA	MUNICIPIO
C/Einstein, 1. Edificio Rectorado 4º Piso. Ciudad Universitaria de Cantoblanco.	28049	Madrid	Madrid
EMAIL	MÓVIL	FAX	CARGO
rector@uam.es			Rector de la Universidad Autónoma de Madrid
9.3 SOLICITANTE			
NIF	NOMBRE	PRIMER APELLIDO	SEGUNDO APELLIDO
05384563X	Manuel	Alcamí	Pertejo
DOMICILIO	CÓDIGO POSTAL	PROVINCIA	MUNICIPIO
Departamento de Química. Módulo 13. Facultad de Cienicas. Ciudad Universitaria de Cantoblanco.	28049	Madrid	Madrid
EMAIL	MÓVIL	FAX	CARGO
manuel.alcami@uam.es	645837640	914975238	Catedrático de Química Física. Universidad Autónoma de Madrid.

## ANEXOS : APARTADO 6.1

Nombre : EQUIPOSINVESTIGACION.pdf

HASH MD5 : 1a641b87b65fcb5d6650aecbd9313948

Tamaño : 298299

EQUIPOSINVESTIGACION.pdf

BO  
R  
D  
A  
D  
O  
R

BOBBERDORR