

1. DESCRIPCIÓN DEL TÍTULO

1.1. DATOS BÁSICOS

NIVEL	DENOMINACIÓN ESPECÍFICA	CONJUNTO	CONVENIO	CONV. ADJUNTO
Doctor	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 de Barcelona; la Universidad de Cantabria; la Universidad de Extremadura; la Universidad de las Illes Balears; la Universidad de Murcia; la Universidad de Oviedo; la Universidad de Sevilla; la Universidad de Vigo; la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea; la Universidad Jaume I de Castellón y la Universitat de València (Estudi General)	Nacional		Ver anexos. Apartado 1.
ISCED 1		ISCED 2		
Química				
AGENCIA EVALUADORA		UNIVERSIDAD SOLICITANTE		
Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación		Universidad Autónoma de Madrid		

1.2 CONTEXTO

CIRCUNSTANCIAS QUE RODEAN AL PROGRAMA DE DOCTORADO
<p>La modelización computacional a nivel molecular se ha afianzado 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 personal experto en estos campos. Dicha demanda no viene sólo del mundo de la academia, también empieza a venir de la industria, donde cada vez más empresas ven en la modelización a escala molecular una herramienta que permite avanzar rápidamente en la síntesis de nuevas sustancias funcionales o nuevos materiales, además de abaratar costes en la obtención de los mismos y en el estudio de sus propiedades.</p> <p>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 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 esta 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 dentro del sector industrial.</p> <p>Por otro lado, la demanda de programas de doctorado entre titulados y tituladas en Química y Física ha ido en aumento, según los informes sobre inserción laboral de la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) y de la Universidad de Valencia (UV) realizados por el observatorio de empleo de la UAM y el observatorio de Inserción y Asesoramiento Laboral de la UV. Informes que se pueden consultar en los siguientes vínculos:</p> <p>http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1234886379182/contenidoFinal/Publicaciones_y_resultados.htm</p> <p>http://www.fguv.org/opal/index.asp?ra_id=267</p> <p>Considerando que tanto la demanda de programas de doctorado como la demanda de personal experto en Química Teórica y Modelización Computacional requerido tanto por la industria y la academia son crecientes, se ha diseñado la estructura del programa de doctorado que aquí se presenta y que trata de compensar ambos aspectos ampliando la oferta de programas y formando personas expertas en el área que sean capaces de entender los métodos, desa-</p>

rollar nuevas metodologías, conocer en detalle su rango de aplicación, interpretar los resultados y aplicar las técnicas de modelización a sistemas de interés químico.

El programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling tiene como fin último preparar investigadores e investigadoras líderes en el uso y desarrollo de los métodos de Química Teórica capaces de trabajar áreas fundamentales de química, física, ciencia de 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 distintas áreas de aplicación y entrar en contacto con investigadores de otras Universidades que podrían ser expertos en técnicas complementarias a las técnicas que los estudiantes vienen aplicando en sus 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 amplio abanico de líneas de investigación, así mismo, abre un mayor universo 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 estudiantes de todos estos grupos.

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, Jaume 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) e 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.

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 Escuela 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. Como ejemplo de escuelas doctorales formadas, a la fecha, podemos citar: Universidad de Barcelona

(http://www.ub.edu/web/ub/es/universitat/campus_fac_dep/facultats_escoles/escola_doctorat/escola_doctorat.html)

Universidad de Cantabria (<http://www.unican.es/Centros/Escuela-de-Doctorado/>)

Universidad de Las Illes Balears (<http://edoctorat.uib.cat/es/>)

Universidad de Sevilla (<http://www.doctorado.us.es/plan-2011/escuela-internacional-de-doctorado>)

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 estudiantes 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 de Coordinación Académica**, cuya composición se detalla en el apartado 5.2, 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. 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, se podrá solicitar la baja temporal del programa por un período máximo de un año, ampliable hasta un año más. Dicha solicitud deberá ser dirigida y justificada ante la Comisión de Coordinación Académica responsable del programa, que se pronunciará sobre la procedencia de acceder a lo solicitado por el doctorando. Todo esto 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
002	Universidad de Extremadura
003	Universidad de las Illes Balears
004	Universidad de Barcelona
012	Universidad de Murcia
016	Universidad de Cantabria
018	Universitat de València (Estudi General)
023	Universidad Autónoma de Madrid
040	Universidad Jaume I de Castellón
038	Universidad de Vigo
020	Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea
017	Universidad de Sevilla
013	Universidad de Oviedo
010	Universidad Complutense de Madrid

1.3. Universidad de Vigo

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
36020556	Facultad de Química

1.3.2. Facultad de Química

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
5	5	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.uvigo.es/uvigo_es/administracion/alumnado/normativa/		
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 Murcia

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
30010218	Facultad de Química

1.3.2. Facultad de Química

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.um.es/web/estudios/contenido/normativa/permanencia		
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
08072152	Escuela de Doctorado de la Universidad de Barcelona

1.3.2. Escuela de Doctorado de la Universidad de 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		
http://postgrau.uab.es/doc/normativa-doctorado-RD99-2001.pdf		
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 Autónoma de Madrid

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS

CÓDIGO	CENTRO
28027060	Facultad de Ciencias

1.3.2. Facultad de Ciencias

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.uam.es/normativadoctoradoUAM		
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 Complutense de Madrid

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
28027837	Facultad de Ciencias Químicas

1.3.2. Facultad de Ciencias Químicas

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://portal.ucm.es/c/document_library/get_file?uuid=97f6af2a-ca00-4d04-b150-f572db6443e4&groupId=244940		
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 Cantabria

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Escuela de Doctorado (EDUC)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.unican.es/Centros/Escuela-de-Doctorado		
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

1.3.2. Centro Internacional de Postgrado

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
5	5	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://cei.uniovi.es/postgrado/doctorado/normativadoctorado		
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

1.3.2. Facultad de Ciencias

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS	
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN
3	3
NORMAS DE PERMANENCIA	

<http://www.unex.es/conoce-la-uex/estructura-academica/centros/ciencias/archivos/ficheros/estudiantes/normativa-de-permanencia/Permanencia2010.pdf>

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
12060026	Escuela de Doctorado de la Universidad Jaume I de Castellón

1.3.2. Escuela de Doctorado de la Universidad Jaume I de Castellón

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.uji.es/bin/infoest/estudis/doctorat/norma.pdf		
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 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

1.3.2. Facultad de Ciencias Químicas

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.ikasketak.ehu.es/p266-shproget/es/contenidos/informacion/indice_doctorados_vregp/es_normativ/normativa.html		
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

1.3.2. Facultad de Química

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.doctorado.us.es/impresos/verificacion/NORMAS%20DE%20PERMANENCIA_web.pdf		
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 las Illes Balears

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
07006071	Facultad de Ciencias

1.3.2. Facultad de Ciencias

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1242652450852/contenidoFinal/Normativa_de_posgrado_UAM.htm		
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. 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

1.3.2. Instituto Universitario de Ciencia Molecular

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.uv.es/fatwirepub/userfiles/file/6.pdf		
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	

1.4 COLABORACIONES

LISTADO DE COLABORACIONES CON CONVENIO			
CÓDIGO	INSTITUCIÓN	DESCRIPCIÓN	NATUR. INSTIT
CONVENIOS DE COLABORACIÓN			
Ver anexos. Apartado 2			
OTRAS COLABORACIONES			
<p>La mayor parte de nuestros estudiantes provienen de dos másteres: el "Máster en Química Teórica y Modelización Computacional" verificado positivamente (resolución 25/09/2013), en el que participan las Universidades Autónoma de Madrid, Universidad de Barcelona, 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, Universidad de Vigo, Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea y la Universidad de Salamanca y el "Máster Interuniversitario de Química Teórica y Computacional" verificado positivamente (Resolución 21/10/2009), en el que participan las Universidades Rovira y Virgili (coordinadora), Universidad Autónoma de Barcelona y Universidad de Girona. Dichos 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 "Master 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.</p> <p>En la actualidad se está en proceso de solicitar un doctorado europeo dentro del marco de los Initial Training Networks (ITN) de la Unión Europea en el que participarían la Universidad Autónoma de Madrid (coordinadora), como socios las siguientes Universidades: Universidad de Barcelona (España), Universidad del País Vasco/ Euskal Herri-</p>			

ko Unibersitateea (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) y Universität Wien (Austria). Este núcleo de universidades hará de universidades "pivote" para el resto de Universidades implicadas en el doctorado. Debido al creciente interés de la modelización en la industria en esta solicitud de doctorado Europeo 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 (IBM Research Zurich GmbH) y SCM (Scientific Computing and Modelling NV), y centros de supercomputación europeos como Barcelona Supercomputing Center -BSC-, CINECA en Italia o IGI (Italian Grid Infrastructure).

2. COMPETENCIAS

2.1 COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES

BÁSICAS

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.

CAPACIDADES Y DESTREZAS PERSONALES

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.

OTRAS COMPETENCIAS

CO-01 - ..

3. ACCESO Y ADMISIÓN DE ESTUDIANTES

3.1 SISTEMAS DE INFORMACIÓN PREVIO

Perfil de ingreso recomendado o idóneo.

Se recomienda que 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. Quienes opten al doctorado y no hayan 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 les provea de un conocimiento adecuado para seguir el doctorado pueden ser considerados como candidatos o candidatas. Las personas candidatas 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 sus directores y, en el caso, sus codirectores o por solicitud de la Comisión de Coordinación Académica del doctorado. El lenguaje empleado en 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.

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 las 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

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

En estos sitios web se especifica tanto las vías y requisitos de acceso, como el perfil de ingreso recomendado. Se especifica además, los conocimientos previos y el nivel recomendado de inglés. Esta información es común para todas las Universidades participantes y está descrita en detalle en el punto 3.2 del presente documento.

Cada Universidad cuenta con Unidades encargadas de dar información y asesoramiento sobre la oferta formativa de postgrado tales como el EIDUS (Escuela Internacional de doctorado de la Universidad de Sevilla, <http://www.doctorado.us.es/oferta-estudios-doctorado>), el OPAL (Observatorio de Inserción Profesional y Asesoramiento Laboral de la Universidad de Valencia, http://www.fgouv.org/opal/index.asp?ra_id=31), la oficina de prácticas externas y orientación para el empleo de la Universidad Autónoma de Madrid (<http://www.uam.es/ope/>), el observatorio del empleo de la Universidad de Extremadura (http://www.unex.es/organizacion/oficinas/orientacion-laboral/areas/observatorio_empleo_universitario/observatorio_empleo), el centro de orientación e información de empleo de la Universidad de Murcia (<http://www.um.es/universidad/publicaciones-umu/guias-umu/guia1112/guia/servicios/coie.html>), o la oficina de empleabilidad de la Universidad de Oviedo (<http://www.uniovi.es/empresas/empleabilidad>), entre otros.

Es de destacar que debido al carácter interuniversitario del doctorado y su conexión con iniciativas a nivel internacional (Initial Training Network Europea, solicitada, y Erasmus Mundus Master, ya concedido), los programas de doctorado y máster a nivel internacional cuentan con una página web propia:

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

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

Desde estas páginas se ofrece también toda la información de acceso y están especialmente orientadas a la captación de estudiantes de países fuera de la UE

Además de los correos electrónicos de los servicios de posgrado de las universidades, donde las personas interesadas pueden aclarar sus dudas sobre el proceso de admisión, el programa de doctorado cuenta con una dirección institucional propia (emtccm@uam.es) desde donde se atienden todas las dudas de personas interesadas 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 programa Erasmus Mundus, se realiza una política activa de promoción del doctorado, y su máster 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 Plataforma:

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

- Madrid I+D:

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/>

Acogida y orientación a estudiantes de nuevo ingreso

Los estudiantes inscritos en el programa serán recibidos en su primer día por la persona encargada de la coordinación del doctorado en su universidad. El coordinador los presentará al resto de personal, les explicará los procedimientos propios de la universidad y los pondrá en contacto con la oficina de gestión del doctorado para requerimientos posteriores relacionados con el mismo.

3.2 REQUISITOS DE ACCESO Y CRITERIOS DE ADMISIÓN

Requisitos de Acceso

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.

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 al 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 la persona interesada 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.

Criterios de Admisión

Los estudiantes que cumplan los requisitos de acceso detallados anteriormente, podrán ser admitidos en el programa de Doctorado. La **Comisión de Coordinación Académica del Programa de Doctorado** en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling, cuya composición se detalla en el apartado 5.2, analizará las solicitudes de admisión valorando los siguientes aspectos y méritos. Se indica entre paréntesis el peso específico, en términos porcentuales, de cada uno de los criterios de admisión que se utilizará para evaluar el CV del candidato o candidata.

- Las calificaciones obtenidas en el grado y/o máster que haya realizado (55%)
- Las publicaciones en revistas y comunicaciones a congresos realizadas, en especial las derivadas de la tesis de máster (15 %).
- Certificado de Nivel de inglés, mínimo recomendado B2 (10 %)
- Carta de referencia de dos profesores que no pertenezcan al programa de doctorado y que hayan participado en la formación del estudiante (10%)
- Otros méritos relevantes alegados en su CV (10 %)

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. Los criterios y procedimientos de admisión para estudiantes que opten por esta modalidad de estudios serán exactamente los mismos que los de estudiantes a tiempo completo. El alumnado podrá cambiar de modalidad de tiempo parcial a completo o viceversa, previa solicitud y aprobación por parte de la Comisión de Coordinación Académica del Doctorado.

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 máster en "Química Teórica y Modelización Computacional", el máster "Química Teórica y Computacional" o másteres en las áreas de Química, Física, Ciencias de los Materiales con un importante contenido teórico y orientación investigadora. Egresados de los dos másteres indicados constituyen el mayor porcentaje de estudiantes de nuevo ingreso en este programa de doctorado. Sin embargo, también existen estudiantes provenientes de otros masters de orientación investigadora impartidos en las Universidades participantes. En aquellos casos en los cuales la Comisión de Coordinación Académica considere que la formación previa de la persona candidata no es suficiente o no es adecuada para el acceso al programa de doctorado, se podrá exigir que se realicen complementos de formación específica.

Admisión de estudiantes con necesidades educativas especiales:

Respecto a los sistemas y procedimientos de admisión adaptados a los estudiantes con necesidades educativas especiales podemos decir que cada universidad cuenta con servicios que prestan apoyo al colectivo de estudiantes con necesidades educativas especiales derivadas de su condición de discapacidad. Asimismo, y de acuerdo con el Real Decreto 1892/2008, de 14 de noviembre, por el que se regulan las condiciones para el acceso a las enseñanzas universitarias oficiales de grado y los procedimientos de admisión a las Universidades públicas españolas se reservará un 5 por 100 de las plazas disponibles para estudiantes que tengan reconocido un grado de discapacidad igual o superior al 33 por 100, así como para aquellos estudiantes con necesidades educativas especiales permanentes asociadas a circunstancias personales de discapacidad, que durante su escolarización anterior hayan precisado de recursos y apoyos para su plena normalización educativa.

La **Comisión de Coordinación Académica** evaluará en detalle las solicitudes provenientes de estudiantes con necesidades educativas específicas derivadas de su discapacidad. En los 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 analizará de forma individualizada las posibles adaptaciones curriculares.

Siendo conscientes de la necesidad de fomentar la participación de mujeres y personas de grupos minoritarios en carreras de ciencia y tecnología, el programa seguirá en la contratación de personal de investigación las directrices y principios contenidos en "Estrategia de recursos humanos para la incorporación de investigadores bajo el cumplimiento de la Carta Europea del investigador y el Código de Conducta para la contratación de investigadores" (Human Resources Strategy for Researchers Incorporating the Charter & Code).

3.3 ESTUDIANTES

El Título está vinculado a uno o varios títulos previos

Títulos previos:

UNIVERSIDAD	TÍTULO
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 Autónoma de Madrid	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
Universidad de Murcia	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	25	7
Año 2	27	7
Año 3	18	7
Año 5	15	7
Año 4	16	7

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 Máster en Química Teórica y Computacional.

En aquellos casos en que se haya realizado un grado o un máster distinto a los indicados la Comisión de Coordinación Académica podrá establecer complementos de formación que serán en cualquier caso, asignaturas del primer año de los citados másteres hasta un máximo de 20 créditos. Estos complementos de formación específica tendrán, a efectos de precios públicos y de concesión de becas y ayudas al estudio, la consideración de formación de nivel de doctorado. El tiempo que se dedique a esta formación específica no se computará a efectos del límite de tres años a contar desde la admisión del doctorando o doctoranda al programa, hasta la presentación de la tesis doctoral, tal y como establece el artículo 3.2 del RD 99/2011 Los complementos de formación cursados se registrarán en el documento de actividades del doctorando.

Aquellos casos en los que la vía de acceso sea un grado cuya duración sea de al menos 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 los anteriores casos el director o directora de tesis estará encargado de sugerir los complementos requeridos y será la Comisión de Coordinación Académica del doctorado la que finalmente decida los complementos de formación a realizar por cada estudiante a la vista de su historial académico previo.

Como complementos de formación se impartirán las asignaturas obligatorias del primer año de los másteres mencionados, no superando el alumno en ningún caso un total de más de 20 ECTS. En particular se considerarán alguna de las siguientes asignaturas:

- Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica (5 ECTS)
- Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación (5 ECTS)
- Métodos de la Química Teórica I (5 ECTS)
- Métodos de la Química Teórica II (5 ECTS)

Estas asignaturas se realizarán después de la admisión y matriculación al programa de doctorado y se podrán seguir a nivel local o en cursos intensivos organizados de forma conjunta por las Universidades participantes. Se dispondrá, como máximo, de un curso académico para superar los complementos de formación requeridos. Se tendrán que superar los mismos para continuar el programa de doctorado..

Independientemente del grado realizado previamente, todos los alumnos que no hayan realizado un máster que incluya el aprendizaje de Química Teórica o herramientas de simulación deberán realizar complementos de formación. A la hora de asignar los complementos formativos se estudiará cada caso individualmente. Se considerarán los siguientes perfiles genéricos:

1- Alumnos provenientes del grado de Química y de másteres de Química que no incluyan formación específica en técnicas de simulación o Química Teórica. Deberán realizar las 4 asignaturas mencionadas.

2- Alumnos provenientes del grado de Física o Ciencias de Materiales y de másteres de Física deberán realizar las asignaturas: Métodos de la Química Teórica I y Métodos de la Química Teórica II (5 ECTS)

3- Alumnos provenientes del grado y másteres de Matemáticas Deberán realizar las asignaturas: Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación, Métodos de la Química Teórica I y Métodos de la Química Teórica II (5 ECTS)

4- El resto de alumnos provenientes de otros grados y másteres deberán cursar las 4 asignaturas mencionadas.

A la vista de la formación previa, el Curriculum Vitae y los cursos realizados de cada estudiante analizando toda la trayectoria formativa previa del estudiante (estudios de grado y master realizados y las asignaturas cursadas en ellos) la comisión de coordinación Académica podrá decidir que un estudiante haga menos cursos que los indicados anteriormente.

4. ACTIVIDADES FORMATIVAS

4.1 ACTIVIDADES FORMATIVAS		
ACTIVIDAD: Asistencia a seminarios de investigación		
4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS	20
DESCRIPCIÓN		
<p>El número de horas por año es indicativo.</p> <p>Actividad que consiste en la asistencia a seminarios impartidos por personal investigador vinculado al programa de doctorado o personal investigador invitado de reconocido prestigio (preferiblemente de centros de investigación extranjeros). El objetivo es tener cada mes, durante el período lectivo, un seminario en el cual un investigador o investigadora explique su trabajo a todo el alumnado del programa de doctorado. La lengua en la que se imparte es preferentemente inglés.</p> <p>Se recomienda con carácter general la asistencia a 5 seminarios por año, impartidos en la Universidad de ingreso. Esta recomendación es aplicable a todo personal inscrito tanto a tiempo parcial como a tiempo completo.</p> <p>Se espera que con esta actividad alumnos y alumnas sean capaces de demostrar la adquisición de las competencias: CB11, CB15 y CA05.</p>		
4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN		
<p>El estudiante realizará un breve resumen del seminario o de los aspectos más relevantes aprendidos durante el mismo. La tutora o tutor de cada estudiante de doctorado incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de asistencia a seminarios durante el año y una valoración del aprovechamiento de los mismos por parte del estudiante. Este documento se remitirá a la Comisión de Coordinación Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando o de la doctoranda.</p>		
4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD		
<p>Esta actividad, al tratarse de seminarios locales, no implica movilidad.</p>		
ACTIVIDAD: Asistencia a cursos especializados		
4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS	80
DESCRIPCIÓN		
<p>El número de horas es indicativo.</p>		

El estudiantado 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 el seguimiento de este tipo de cursos no es obligatorio, se recomienda, tanto para personal inscrito en el programa a tiempo completo como a tiempo parcial, la asistencia a un curso de formación especializado a lo largo del periodo de elaboración de la tesis doctoral. En el caso de personas inscritas a tiempo parcial se tendrá en cuenta las limitaciones de fechas y horarios.

Se espera que esta actividad contribuya a adquirir las competencias: CB11, CB14, CB15, CB16, CA05 y CA06.
En cualquier caso tanto para estudiantes a tiempo completo como parcial, será obligatorio realizar durante el periodo de elaboración de la tesis doctoral al menos dos de las siguientes tres actividades: asistencia a cursos especializados, asistencia a congresos o la reunión anual del programa de doctorado.

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

El tutor o tutora de cada estudiante de doctorado 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 de Coordinación Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando o doctoranda.

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 dos congresos científicos durante la realización de su tesis doctoral. El congreso debe ser preferentemente de carácter internacional y de alto prestigio en el campo de investigación del doctorando o doctoranda. Regularmente los congresos nacionales o internacionales en el ámbito de la Química Computacional implican la participación de cada estudiante con la presentación de una contribución científica ya sea oral o en poster sustentados en lengua inglesa.

En cualquier caso tanto para estudiantes a tiempo completo como parcial, será obligatorio realizar durante el periodo de elaboración de la tesis doctoral al menos dos de las siguientes tres actividades: asistencia a cursos especializados, asistencia a congresos o la reunión anual del programa de doctorado.

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

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

La tutora o tutor de cada estudiante de doctorado 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 de Coordinación Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando o doctoranda.

4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

La asistencia a congresos requerirá en la mayoría de los casos movilidad que podría ser financiada con cargo a proyectos propios del equipo de investigación en el cual participe cada estudiante de doctorado 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

La persona candidata al doctorado, tanto a tiempo parcial como completo, deberá preparar y presentar dos seminarios con carácter formal.

El primero de ellos se realizará durante los primeros 18 meses y contendrá la formulación de su plan de trabajo de investigación y sus 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. El idioma empleado será el mismo a utilizar en su exposición de tesis.

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

El tiempo estimado incluye el tiempo de preparación de los seminarios y es indicativo.

Se espera que con esta actividad cada estudiante sea capaz de demostrar la adquisición de las competencias: CB15 y CA06.

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

La tutora o tutor incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando un informe con todos los datos de presentación de seminarios realizados por la persona candidata a doctor o doctora. Dicho informe incluirá una breve evaluación por parte de un profesor o investigador de la calidad del seminario impartido y podrá dar sugerencias de mejora al doctorando. Este documento se remitirá a la Comisión de Coordinación Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando o de la doctoranda.

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.

ACTIVIDAD: Asistencia a la reunión anual del doctorado (Workshop internacional) organizado por el programa de doctorado.

4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS	32
---------------------	-------------	----

DESCRIPCIÓN

Cada año se organizará la reunión anual del doctorado de duración entre dos y tres días con el objetivo de reunir estudiantes, 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. Doctorandas y doctorandos realizarán presentaciones orales con los resultados alcanzados hasta este momento en su actividad investigadora. Dichas presentaciones permitirán una valoración de las actividades que se han realizado hasta el momento. Los encuentros contarán con la participación de estudiantes de Universidades Europeas con las que se mantienen acuerdos de colaboración (universidades implicadas en la solicitud de una Initial Training Network) y tendrá consideración de "workshop" internacional.

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 nuestros estudiantes en la industria. Las reuniones contarán con la colaboración de empresas que apoyan el doctorado.

Regularmente el lenguaje de participación será el inglés.

En cualquier caso tanto para estudiantes a tiempo completo como parcial, será obligatorio realizar durante el periodo de elaboración de la tesis doctoral al menos dos de las siguientes tres actividades: asistencia a cursos especializados, asistencia a congresos o la reunión anual del programa de doctorado.

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

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

Una parte del profesorado 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 o candidata a doctor, dando especial importancia a la capacidad demostrada al responder preguntas.

Después del workshop las personas responsables de evaluar producirán un informe de cada estudiante de doctorado indicando sus fortalezas y debilidades. Dicho informe será enviado tanto al estudiante como a su tutor y director. Toda la información referente a la participación de cada estudiante en el workshop, entendiéndose, presentación realizada e informe de quienes le evaluaron, se recogerá en su Documento de Actividades. Dicho documento será remitido por el tutor o tutora a la Comisión de Coordinación Académica del programa de doctorado y se incorporarán los datos al registro de actividades de la doctoranda o doctorando.

4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

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.

ACTIVIDAD: Elaboración de trabajos publicables en revistas de difusión científica.

4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS	200
---------------------	-------------	-----

DESCRIPCIÓN

El número de horas es indicativo.

La persona candidata a doctor participará de forma activa en la redacción de los artículos que recojan los resultados de su investigación para su publicación 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.

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 la posibilidad de que los resultados obtenidos estén sujetos a protección de propiedad intelectual, hecho que puede impedir la publicación de los mismos en revistas científicas.

Se espera que con esta actividad el estudiante sea capaz de demostrar la adquisición de las competencias CB13, CB14, CB15, CA02 y CA06.

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

La tutora o tutor incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los trabajos publicados en revistas científicas en las que la persona candidata 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 de Coordinación Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando o doctoranda.

4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

Esta actividad no implica movilidad.

ACTIVIDAD: Estancias de investigación en centros extranjeros.

4.1.1 DATOS BÁSICOS

Nº DE HORAS

480

DESCRIPCIÓN

Se recomienda que cada estudiante realice durante su doctorado al menos una estancia de 3 meses en un centro de investigación extranjero.

Estas estancias tendrán como fin principal realizar parte de investigación y se considera una pieza fundamental de la formación, 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. Además, la realización de esta estancia es un requisito para obtener la mención internacional, que se fomentará en cada estudiante del programa.

El número de horas es indicativo y considera el tiempo dedicado al aprendizaje de nuevas técnicas y al trabajo diario en el centro. Actividades de tipo: asistencia a cursos o presentación o asistencia a seminarios impartidos en el centro, se considerarán en su correspondiente actividad formativa.

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 cada estudiante sea capaz de demostrar la adquisición de las competencias CB12, CA03, CA04 y CA05.

Planificación temporal

Se realizará preferentemente dentro de su segundo año, para estudiantes a tiempo completo, o dentro de su tercer año, para alumnos a tiempo parcial. Estos últimos podrán fraccionar su estancia como mejor les convenga.

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

Durante su estancia cada estudiante trabajará en supervisión de un profesor-investigador, de uno u otro sexo, del centro extranjero, quien realizará un informe final sobre el trabajo hecho en 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, etc), así como la formación recibida en técnicas específicas.

Prevía a la realización de la estancia la Comisión de Coordinación Académica será informada de los detalles de la misma y autorizará su ejecución.

El director o directora 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 de la doctoranda o 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

El número de horas es indicativo.
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, empleabilidad, 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.

La Formación Transversal servirá para desarrollar las competencias: CB14, CB15 y CB16.

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

La tutora o tutor incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de cursos de formación transversal realizados por la persona candidata a doctor con su correspondiente certificado. Este documento se remitirá a la Comisión Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando o doctoranda.

Además, la Universidad podrá establecer otros procedimientos de control de las actividades formativas que, junto a la asistencia, permitan garantizar la adecuada adquisición de competencias.

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 del personal inscrito en este programa de doctorado 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 otorgado por el curso intensivo común con otras 46 instituciones europeas de 8 países distintos y por la 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, vínculo aprovechable en el doctorado.

Desde la Comisión de Coordinación 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, sea hombre o mujer, de instituciones de educación superior o de investigación no españolas y que al menos un o una 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 director experimentado o directora experimentada y director o directora novel a fin de formar en esta labor. Para ello se tiene prevista entre otras actividades una reunión anual de directores en donde se intercambiarán impresiones y experiencias en esta labor.

El programa de doctorado contempla la realización de actividades a nivel internacional por parte de los estudiantes y la colaboración con otras universidades no españolas con las que se participa en actividades conjuntas como el Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional o la presentación de proyectos europeos conjuntos a nivel de doctorado. Para coordinar estas actividades conjuntas se contará con un Comité Internacional encargado entre otras cosas de: coordinar workshops internacionales o 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 Association).

Guía de buenas prácticas para la dirección de tesis doctorales:

Toda persona perteneciente al programa de doctorado cumplirá el código de buenas prácticas adoptado por la Escuela Doctoral a la cual está inscrito. De acuerdo con el Real Decreto 99/2011, de 28 de enero.

Algunas Universidades tienen elaborado, a la fecha, su código de buenas prácticas como es el caso de la Universidad de Barcelona (<http://hdl.handle.net/2445/28543>) y la Universidad de Sevilla (http://www.doctorado.us.es/impresos/verificacion/CODIGO_BUENAS_PRACTICAS_web.pdf)

Además, el programa de doctorado tendrá su propia guía de buenas prácticas que será aprobado por la Comisión de Coordinación 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 profesorado) del programa para su consulta y cumplimiento.

5.2 SEGUIMIENTO DEL DOCTORANDO

Con carácter general, para supervisión y seguimiento del doctorando se aplicará lo dispuesto en el artículo 11 del R.D 99/2011 de 28 de enero, por el que se regulan las enseñanzas oficiales de doctorado. En cualquier caso se aplicará procedimiento de desarrollo de esta normativa que con carácter general aprueben las Universidades para el seguimiento del doctorando.

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

La **Comisión de Coordinación Académica del Programa de Doctorado** estará compuesta por un profesor o profesora de cada una de las universidades participantes (Coordinador o Coordinadora Locales) y realizará las tareas de coordinación entre las universidades. Estará encargada de la admisión de estudiantes, de evaluar anualmente el documento de actividades y el plan de investigación, de autorizar estudios de doctorado a tiempo parcial, bajas temporales del programa, codirecciones, estancias y actividades a los doctorandos, además, asignará tutores, directores y codirectores, de uno u otro sexo. La Comisión de Coordinación Académica se reunirá presencialmente al menos una vez al año y mediante la plataforma de reuniones virtuales disponible en el programa de doctorado (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/a del Programa de Doctorado y Coordinadores Locales.

Los Coordinadores Locales son elegidos por acuerdo en cada Universidad entre los profesores titulares o catedráticos que participen en el programa de doctorado y que cuenten con experiencia acreditada en investigación y dirección de tesis doctorales. Serán avalados por la Universidad respectiva y adicionalmente se podrán integrar investigadores de otros organismos públicos de investigación, así como de otras entidades o instituciones implicadas en la R+D+i, tanto nacionales como internacionales con las que se suscribe el correspondiente convenio de colaboración.

El/la Coordinador/a del Programa de Doctorado estará designado por acuerdo de los Rectores de las Universidades participantes a propuesta de la Comisión de Coordinación Académica. El coordinador del programa deberá ser un investigador relevante, avalado por la dirección previa de al menos dos tesis doctorales, la última en los últimos 5 años, y estar en posesión de al menos dos periodos de actividad investigadora reconocidos de acuerdo con las previsiones del Real Decreto 1086/1989, de 28 de agosto, debiendo haber sido concedido el último de ellos en los últimos 7 años.

La Coordinadora o Coordinador del Programa de Doctorado actúa como Presidenta o Presidente de la Comisión de Coordinación 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 participante.

Procedimiento utilizado por la Comisión de Coordinación Académica del Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional para la asignación del tutor y del director de tesis de los doctorandos así como su eventual cambio

Todas las universidades participantes en el Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional se acogen al siguiente procedimiento para la asignación del tutor y del director de tesis de los doctorandos así como su eventual cambio.

Una vez admitido un estudiante en el programa de doctorado, a la vista de la documentación la Comisión de Coordinación Académica asignará a cada doctorando y doctoranda:

- En el momento de admisión al programa: un tutor o tutora, que será doctor, con acreditada experiencia investigadora y vinculación permanente a la institución donde está matriculado el doctorando. El tutor servirá de nexo entre la comisión de coordinación académica del programa de doctorado, la Universidad donde se encuentra matriculado el doctorando y el alumno.

- En un plazo máximo de seis meses desde su matriculación: un director o directora. Esta figura podrá ser coincidente o no con el tutor. Quién se encargará de dirigir el buen desarrollo de la investigación. Será un doctor o doctora de cualquier nacionalidad con acreditada experiencia investigadora. La tesis podrá ser codirigida 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 de Coordinación Académica aprobará la codirección y nombrará directores para la tesis. Una tesis doctoral podrá ser dirigida como máximo por dos doctores, de uno u otro sexo.

Las universidades establecerán las funciones de supervisión de estudiantes de doctorando mediante un compromiso documental firmado por: Universidad, estudiante, tutor y 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.

El procedimiento para la firma de este compromiso por parte del director, tutor y doctorando será el siguiente:

- Admitido el doctorando al programa, el formulario del compromiso documental será entregado al doctorando en el momento de formalizar su matrícula.
- En el plazo de seis meses desde la matriculación, deberá entregar el compromiso documental firmado por su director y tutor de tesis, para anexar al documento de actividades y archivar en su expediente personal

La Comisión de Coordinación Académica, oído el doctorando, podrá modificar tanto tutor o tutora como director o directora de tesis en cualquier momento del periodo de realización del doctorado, siempre que concurren razones justificadas. Una vez recibida la petición justificada por parte del doctorando de cambio de tutor o director de tesis, la comisión de coordinación académica del programa de doctorado nombrará un instructor, que será un doctor que participe en el programa de doctorado y con experiencia acreditada en dirección de tesis, que oídos el doctorando, el tutor y el director de tesis elaborará un informe sobre la pertinencia o no del cambio solicitado. A la vista del informe, la Comisión de Coordinación Académica decidirá sobre la pertinencia o no de la modificación del nombramiento de tutor o director de tesis.

Procedimiento utilizado en el programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional para el control del registro de actividades de cada doctorando y la certificación de sus datos:

Todas las actividades formativas realizadas, y, si es el caso, los complementos formativos cursados, se registrarán en un documento único para el programa de doctorado e individualizado denominado Documento de Actividades del/ de la Doctorando/a, que será revisado regularmente por el director y el tutor de tesis. La tutora o tutor remitirá dicho documento a la Comisión de Coordinación Académica al menos una vez al año.

A partir de la admisión de cada estudiante se abrirá, por parte de los servicios de coordinación académica del doctorado, un expediente personalizado donde se recopilarán:

- La documentación aportada por cada estudiante para el ingreso en el doctorado.
- El compromiso documental.

- El Plan de Investigación que incluirá, al menos, los objetivos, la metodología y la planificación temporal. Este plan deberá ser avalado por director de tesis y el tutor (en caso de ser distintos) y podrá mejorarse y detallarse a lo largo del desarrollo de la tesis doctoral.
- Copia de todas las resoluciones emitidas por la Comisión de Coordinación Académica que afecten al doctorando o doctoranda (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 que recogerá todos los informes emitidos por el tutor relativos a las actividades formativas realizadas por el doctorando o doctoranda en cada periodo así como también los justificantes de las mismas, y, si es el caso, los complementos formativos cursados.
- En el caso de tesis cotuteladas entre dos instituciones del mismo o diferentes países, el Documento de Actividades recogerá de forma detallada el tiempo que los estudiantes pasaron en cada una de las instituciones.

Procedimiento empleado en el programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional para la revisión y evaluación anual del Plan de investigación y el registro de actividades del doctorando:

Tanto el tutor como el director/es revisarán regularmente el registro de actividades del doctorando, certificarán los datos del doctorando, y en especial, todas las actividades formativas realizadas. Anualmente redactarán un informe sobre las actividades del doctorando y un informe sobre grado de cumplimiento del plan de investigación y sus posibles modificaciones. Estos informes junto con el registro de actividades del doctorando actualizado, se elevará a la Comisión de Coordinación Académica del doctorado para su evaluación.

La Comisión de Coordinación Académica evaluará cada curso académico el plan de investigación y el registro de actividades de actividades. El plan de investigación se evaluará basándose 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 dicho cambio deberá estar avalado por el tutor o tutora y la directora o director. La evaluación positiva será un requisito imprescindible para continuar en el programa. En caso de evaluación negativa deberá ser evaluado de nuevo en un plazo máximo de seis meses a cuyo efecto se elaborará un nuevo plan de investigación. Una segunda evaluación negativa causará la 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 en cuanto a disponibilidad de tiempos y horarios para realizar determinadas actividades.

Previsión de las estancias de estudiantes en otros centros, nacionales e internacionales, co-tuteladas y menciones europeas:

Desde el programa de doctorado se potenciará que los estudiantes realicen al menos una estancia de 3 meses en centros extranjeros durante su doctorado y obtendrán así, la mención internacional. En caso que el estudiante realice el doctorado a tiempo parcial, podrá fraccionar la estancia como mejor le convenga

Además el estudiante podrá realizar estancias en cualquier centro perteneciente a las universidades participantes del programa. Las estancias nacionales no habilitan para la obtención de la mención internacional. La realización de estancias nacionales e internacionales deberá estar estrictamente dirigidas a la realización de la tesis doctoral y se deberá contar con la autorización del director o directora para la realización de las mismas. Asimismo, estará dentro de las funciones de dirección de tesis la evaluación de los resultados específicos de dicha estancia y verificar que quede registrado en el documento de actividades.

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

Tal y como se ha detallado en el apartado 1.4. Colaboraciones. El programa de doctorado que se presenta tiene una fuerte vinculación con una red de 46 universidades europeas que formó el consorcio que desarrollo el master en "Theoretical Chemistry and Computational Modelling" y que posteriormente, en 2010, fue reconocido como Master Erasmus Mundus. Además en la actualidad se está en proceso de solicitar un doctorado europeo dentro del marco de los Initial Training Networks (ITN) de la Unión Europea en el 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) y Universität Wien (Austria).

Es por lo tanto habitual que algunas de las tesis que se presentan en el programa de doctorado se realicen en cotutela con grupos de investigación de las Universidades pertenecientes a esos consorcios europeos. De hecho en el caso de que la solicitud de ITN fuera aprobada, todas las tesis financiadas por ese proyecto se realizarían en cotutela. Además dichas redes promueven que los estudiantes realicen estancias de investigación en centros extranjeros.

En el programa conjunto de doctorado en "Química Teórica y Modelización Computacional" del cuál deriva la presente propuesta el 90% de los estudiantes realizaron estancia de investigación de al menos tres meses en centros extranjeros y por lo tanto pudieron optar a la mención europea y el 20% de las tesis se realizaron en cotutela. La estimación es que el presente programa de doctorado mantendrá cifras similares.

5.3 NORMATIVA PARA LA PRESENTACIÓN Y LECTURA DE TESIS DOCTORALES

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

Una vez elaborada la tesis doctoral, y después del informe favorable del director o directores de la tesis y del tutor de la tesis (si lo hay), el doctorando ha de solicitar a la Comisión de Coordinación Académica del programa de doctorado la autorización para proceder a la presentación de la misma. Una vez autorizada la tesis por la Comisión de Coordinación Académica del programa de doctorado se presentará en la Universidad o Escuela de Doctorado donde esté matriculado, siguiendo los plazos y procedimientos establecidos por los órganos responsable del doctorado en cada institución.

El tribunal encargado de juzgar la tesis doctoral será propuesto por la comisión de coordinación académica del programa de doctorado y aprobado por el respectivo órgano competente de la universidad donde se encuentre matriculado el alumno. La propuesta de tribunal irá acompañada de un informe razonado sobre la idoneidad de todos y cada uno de los miembros propuestos para constituir el tribunal.

Los tribunales estarán formados por al menos tres miembros titulares y los suplentes necesarios, salvo en los casos de convenio de cotutela, debiendo respetarse en su composición los siguientes requisitos:

- Todos los miembros habrán de estar en posesión del título de doctor o doctora, podrán ser españoles o extranjeros y deberán poseer experiencia acreditada en investigación.
- En todo caso, el tribunal estará formado en su mayoría por miembros externos a la Universidad y a las instituciones colaboradoras en la Escuela o programa.
- En ningún caso podrán formar parte del tribunal el director o directora de la tesis ni el tutor o tutora, salvo los casos de tesis doctorales presentadas en el marco de acuerdos bilaterales de cotutela con universidades extranjeras que así lo tengan previsto.

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.

La defensa de la tesis será evaluada en la universidad española en la que el doctorando esté matriculado. En el caso de programas tesis cotuteladas 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 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. Los doctores presentes en el acto público podrán formular cuestiones en el momento y forma que señale el presidente del tribunal.

El tribunal emitirá un informe y la calificación global concedida a la tesis de acuerdo con la siguiente escala: No apto, aprobado, notable y sobresaliente. El tribunal podrá otorgar la mención 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. El presidente seguirá el mecanismo habilitado por la Universidad donde se realiza la defensa para garantizar que el escrutinio de los votos para dicha concesión se realice en sesión diferente de la correspondiente a la de defensa de la tesis doctoral.

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 de coordinación 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 registro 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	Estructura Molecular y Reactividad Química.

02	Desarrollo de Métodos de Simulación en Química.
03	Estados Excitados y Fotoquímica.
05	Bioquímica Computacional.
07	Sólidos y Superficies.
08	Estudio de Nuevos Materiales.
06	Procesos Inducidos por Láseres.
04	Química Organometálica Computacional.

Equipos de investigación:

Ver anexos. Apartado 6.1.

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

El programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling reúne el conjunto más grande de académicos de toda España en el área (páginas 1-5 del anexo), entre los cuales, el 20 % está constituido por investigadoras y el 80% por investigadores. Todas y todos de enorme prestigio y renombre en el campo. Se trata de docentes investigadores que están vinculados con las trece Universidades del convenio, y se reparten en 8 líneas de investigación que generan nuestros 8 grupos interuniversitarios de investigación, a saber: Estructura molecular y reactividad química, desarrollo de métodos de simulación en química, estados excitados y fotoquímica, química organometálica computacional, bioquímica computacional, procesos inducidos por láseres, sólidos y superficies y, estudio de nuevos materiales. Nuestra plantilla cuenta con los profesores de la Universidad Complutense de Madrid: J.L. Abascal Carlos, Vega, Luis Bañares, Antonio Rey y Francisco Javier Aoz Moleres. Quienes además participan en el programa de doctorado con mención de calidad titulado "Química Avanzada", propio de su universidad.

Además de los investigadores incluidos en las páginas 1-5 del anexo, se ha previsto la participación de expertas y expertos internacionales en el programa de doctorado en todos aquellos casos en los cuales el candidato a doctor desee obtener la Mención internacional en su Título de Doctor o Doctora. Esto implica la realización de una estancia de mínimo tres meses en un centro de investigación extranjero (Actividad 07 de la presente memoria). Por lo general, los expertos están vinculados con alguna Universidad perteneciente al Comité Internacional del Máster en Theoretical Chemistry and Computational Modelling con los cuales hay activas colaboraciones.

La reconocida trayectoria en investigación del personal académico del programa se refleja en la confianza que diversas entidades expresan en forma de concesión de proyectos. Entidades tales como: Comunidades Autónomas, antiguo Ministerio de Ciencia e Innovación, Ministerio de Economía y Competitividad o Unión Europea, información detallada en páginas 6, 24-28 del anexo. Entre los proyectos concedidos podemos citar los Advanced Grants titulados "Advances multiscale simulation of

DNA" y "XUV/X-ray for ultrafast electronic control in chemistry" de respectivas referencias SimDNA y FP7-IDEAS-2011-AdG:290853. Así como: "Cost-Efficient Lighting devices based on liquid processes and ionic organometallic complexes (CELLO)" financiado por la Unión Europea/FP7-248043, el proyecto "Scalable software services for life science" financiado por European Commission ScalLife o

el proyecto Consolider CSD2009-00038 "Molecular astrophysics: the Herschel and ALMA era". Su nivel investigador se puede corroborar además con la gran cantidad de contribuciones científicas publicadas. La muestra de publicaciones referenciadas en las páginas 7-11 del anexo están en un rango de índice de impacto de 4-36. Que se pueden catalogar como publicaciones de alto nivel.

Finalmente, la calidad de las tesis doctorales presentadas en el programa (páginas 12-14 del anexo) puede ser considerada muy buena si nos basamos en el rango de índice de impacto (3-12) y demás datos de repercusión objetiva de las contribuciones científicas derivadas de dichas tesis.

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, en particular:

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

La **Universidad de Barcelona** por la dirección de una tesis se computan 20 h/curso, durante un periodo máximo de 4 años. La labor de tutorización se cuenta como 4 h/curso desde el año de matrícula en el programa y hasta un máximo de 4 años.

En Consejo de Gobierno de la **Universidad de Cantabria** (UC) de 24-7-2012 se acordó el reconocimiento de créditos docentes para la función de tutoría de alumnos y de dirección de tesis doctorales en los programas de doctorado regulados según el RD 99/2011.

1. ¿Al tutor del doctorando a tiempo completo se le reconocerán 5 horas de actividad docente (0,5 créditos UC) por alumno al año durante tres años. En el caso de un doctorando a tiempo parcial se le reconocerán al tutor 3 horas de actividad docente (0,30 créditos UC) por alumno al año durante cinco años. Se reconocerá un máximo de 1 crédito por año y por profesor¿.

2. ¿Al director de una tesis doctoral se le reconocerá una carga docente de 30 horas (3 créditos UC), durante dos cursos consecutivos, a partir de la fecha de lectura de la tesis. En el caso de tesis codirigidas por 2 o más profesores, la carga docente se repartirá proporcionalmente entre ellos durante el mismo periodo¿.

La **Universidad Complutense** contabiliza por dirección tesis 20 horas (a dividir entre los codirectores si los hubiese) y con un máximo de 40 horas al año. Por la tutoría de doctorandos se reconocen 5 horas por alumno hasta un máximo de 10 horas por año.

La **Universidad de Extremadura** recoge en sus ζ criterios para elaborar el plan de organización docente de la universidad de Extremadura ζ del 22 de febrero del 2013, reconoce (Artículo 5.6 apartado c)

e. Tesis Doctoral. Computará un crédito por Tesis Doctoral dirigida y defendida para el profesor/director en el Plan de Organización Docente (o la parte proporcional si existiera más de un director). Este cómputo tendrá una vigencia de dos años. El número máximo de créditos por curso académico y profesor será de dos créditos.

Además, la misma normativa contempla la tutoría de doctorado como una actividad docente de atención al estudiante de tipo ζ Tutoría ECTS o programada ζ cuyo límite máximo de dedicación a las actividades docentes de atención al estudiante que desarrolla un profesor durante un curso académico, computado en créditos, estará condicionado por las disposiciones legales vigentes, el cuerpo de pertenencia o categoría laboral, la dedicación temporal de su contrato y las posibles reducciones de sus obligaciones docentes recogidas en los Estatutos de la Universidad de Extremadura

La **Universidad de las Illes Balears** regula la labor de dirección de tesis doctorales en el Acuerdo Normativo 8879/2008, de 19 de diciembre, sobre cómputo de la actividad docente del profesorado de (FOU núm. 306, de 16 de enero), que especifica que la dirección de una tesis doctoral dirigida y leída en la UIB computará como un actividad docente de 20 horas los dos años académicos siguientes a la lectura de tesis. En el caso de dirección múltiple, se contabiliza la fracción correspondiente, a partes iguales, entre los codirectores. La labor de tutorización de tesis queda reflejada dentro de las actividades docentes del profesorado, pero sin computar una cantidad fija de horas, que se asigna en función de la carga docente de los Departamentos.

La **Universidad Jaume I de Castellón** reconoce 0.5 créditos por la dirección de cada tesis, hasta un máximo de 4 tesis (2 créditos). Si son tesis codirigidas se multiplica el número de créditos por 0.75 y si son leídas en otras universidades se les aplica el factor previo y otro 0,75. La labor de tutorización de tesis doctorales queda registrada en los archivos de la Universidad como parte de las tareas docente e investigadora del PDI, el número de horas asignado por esa labor es variable cada año y depende de las condiciones de presupuesto y carga docente en el que se encuentre la universidad.

La **Universidad de Murcia**, por cada tesis doctoral dirigida y defendida en los tres últimos cursos académicos computa 2 créditos a repartir entre los directores. Se añadirá 1 crédito a repartir entre los directores si la tesis posee la mención de doctorado europeo hasta un máximo de 6 créditos. Por la supervisión y seguimiento de doctorandos en el último curso académico (según el RD 99/2011 o legislación posterior) se contabilizan por ser tutor: 0,3 créditos por cada alumno de doctorado. Máximo: 0,6 créditos. Por ser director de tesis doctoral: 0,4 créditos por cada alumno. Máximo: 1,5 créditos. Si el director y el tutor coinciden, se computará 0,7

La **Universidad de Oviedo** en el Artículo 2 del acuerdo en materia de exenciones docentes se reconoce la labor de tutela y dirección de Tesis Doctorales de la siguiente manera: ζ Por cada doctorando tutelado, según lo previsto en el RD 99/2011, de 28 de enero, se reconocerá 1 hora al tutor, siempre que no sea el director de la tesis con un máximo de 10 horas dentro de cada curso académico. Por la dirección de cada tesis doctoral, defendida en los últimos dos años, se reconocerán 20 horas en la dedicación docente con un máximo de 60 horas dentro de cada curso académico. En el caso de la dirección compartida, el reconocimiento docente se distribuirá proporcionalmente entre los directores. El máximo de horas que se imputará a cada profesor por este concepto será de 60 horas dentro de cada curso académico ζ .

La **Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea** UPV/EHU, de acuerdo con el Plan de Dedicación Académica aprobado en Consejo de Gobierno del 27 de Septiembre de 2012, considera que una tesis doctoral dirigida y defendida en la UPV/EHU computará como actividad docente con un reconocimiento de 8 créditos, o 10 créditos si se trata de una tesis internacional, al conjunto de directores y directoras con reparto uniforme entre ellos. Los créditos se imputarán uniformemente entre el segundo y el tercer curso académico posterior a la defensa. El máximo de créditos que se imputará a cada profesor o profesora por este concepto será de 10 créditos dentro de un curso académico. Cada crédito son 25 horas. En el caso de que el tutor de la tesis sea distinto que el director de la misma 1 de los 8 o 10 créditos que se asigna al director se asigna al tutor.

En la **Universidad de Sevilla** anualmente y dependiendo de las disponibilidades presupuestarias y el marco legislativo que afecta a la carga docente del profesorado universitario y a la contratación de nuevo profesorado, el Consejo de Gobierno aprobará el reconocimiento de la dirección y tutorización de tesis doctorales como actividad docente del profesorado universitario según lo establecido en el RD 99/2011. Este reconocimiento se ajustará también a lo establecido en la Normativa de Estudios de Doctorado de la Universidad de Sevilla (acuerdo del Consejo de Gobierno de 17 de junio del 2011) y el Reglamento General de Actividades Docentes de la Universidad de Sevilla.

En la **Universidad de Valencia** la normativa se adapta cada año antes del comienzo del nuevo curso por el consejo de gobierno de la universidad. La actualmente vigente establece, para el curso 2013/2014: Dirección de tesis doctorales: se reconocerá por dirección de tesis doctorales 20 horas por la lectura de cada tesis o 30 horas en caso de tesis con mención internacional. Esta reducción se disfrutará en uno de los dos cursos siguientes a la lectura, previa petición del profesorado dirigida al Vicerrectorado de Ordenación Académica y Profesorado. Cuando haya co-dirección de tesis, la reducción prevista en este apartado se repartirá entre todos los directores y directoras. Puesto que la normativa se adapta cada año, se prevé que pueda regularse para otros cursos durante la vigencia del Doctorado la reducción correspondiente a tutorización de tesis. que en todo caso queda siempre recogida dentro de las memorias de actividades del profesorado.

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.

Además en su Normativa interna de dedicación del profesorado y reconocimiento en POD de actividades del PDI para el curso 2013-14 (apartado 2.3 relativo al reconocimiento y apoyo a la educación de postgrado http://webs.uvigo.es/vicprof/Html/Encargo1314/Norm_Reconhecimento_POD_2013_14.pdf) prevé para los nuevos programas de doctorado un incentivo en horas de docencia gestionadas por las Comisiones Académicas que se pueden aplicar tanto a la dirección como a la tutorización de tesis de doctorado.

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 de investigación 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/etccm/) 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

Para la realización de su labor de investigación el estudiantado 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 revistas electrónicas a través de la base "web of knowledge" del FECYT.
- El Software necesario para realizar su tesis doctoral
- 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.
 - Acceso al Centro de Computación Científica (<https://www.ccc.uam.es/>) localizado en la Universidad Coordinadora (UAM), donde se 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.

Otros Recursos y Servicios.

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 máster 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 de 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.

Otro ejemplo digno de mención es la biblioteca de la Universitat Jaume I que en el año 2004, obtuvo el certificado de calidad para los servicios de biblioteca que promovió ANECA. En el mismo año consiguió el certificado de registro de Empresa por parte de AENOR según los requisitos que marca la norma UNE-EN ISO 9001: 2000, certificado que ha renovado en el año 2010. Tal certificación se aplica a todas las secciones (Centro de Documentación Europea, Documentación del transporte Internacional, Documentación sobre Cooperación al Desarrollo y Solidaridad, Mediateca, Archivo ...) y a todos los numerosos y variados servicios de la Biblioteca: adquisición de documentos, consulta del fondo documental en sala o en red, consulta electrónica de catálogos, préstamo/tele-préstamo, préstamo Inter.-bibliotecario, información bibliográfica y formación de usuarios/as. También cuenta con carta de servicios propia que puede consultarse en <http://www.uji.es/CA/cd/carta/>. Actualmente la biblioteca cuenta con algo más de 500.000 libros, 1.100 títulos de revistas en soporte papel, 32.000 títulos de revistas electrónicas. Como material no librario hay que destacar los 204.000 registros sonoros (discos de vinilo, CD, etc) y las 18.000 microfichas.

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, servicios de atención a personas con discapacidad, oficina de acogida del alumnado, oficina de apoyo a estudiantes extranjeros, servicios de inserción laboral y búsqueda de empleo, etc. En este último aspecto es de mención que se cuenta con el Observatorio de Inserción Profesional y Asesoramiento Laboral (OPAL) a través del cual la Fundación General de la Universidad de Valencia ha sido autorizada y actúa como agencia de colocación especializada en inserción profesional y la oficina de inserción profesional y estancia en prácticas (OIPPEP) de la Universidad Jaume I de Castellón que posee programas de orientación profesional e inserción laboral, organización de ferias y jornadas de seguimiento de personas tituladas. Además, en cada Universidad existen servicios para la atención a personas con discapacidad, que presentan a la comunidad universitaria el apoyo y asesoramiento concreto sobre temas de discapacidad.

Cada Universidad participante en el programa cuenta con un servicio de investigación que contribuye al apoyo, gestión, promoción y difusión de la actividad científica y tecnológica. Actividades fundamentales para favorecer la transferencia de las capacidades del doctorado a la sociedad. Por ejemplo se cuenta con la oficina de transferencia de resultados de investigación de la **Fundación de la Universidad Autónoma (FUAM)**, de la **Universidad de Valencia (OTRI)** o de la **Universidad de Vigo (OTRI)**, entre otras. Los primeros a través de su portal web **PRISMA (Portal de Conocimiento sobre la Investigación y las Capacidades de la UAM)** dan a conocer la información de todos los grupos de investigación de la Universidad Autónoma

de Madrid y sus actividades (líneas de investigación, tecnologías, patentes, servicios, etc) a las empresas e instituciones. El catálogo virtual está disponible en: <http://prisma.fg.uam.es/catalogo>. Los segundos tiene como misión promover y catalizar relaciones eficaces de intercambio de conocimiento aplicado a las necesidades de la Sociedad, y en especial de las empresas, facilitando su transferencia a través de la prestación de servicios de I+D de alto valor añadido, la realización de proyectos conjuntos de I+D realizados bajo contrato o mediante la financiación de fondos públicos competitivos y la puesta en valor de los resultados de la investigación de la UV para su efectiva transferencia a través de la protección del conocimiento mediante títulos de propiedad intelectual e industrial, las licencias y la creación de empresas de base tecnológica.

Las funciones de la Oficina de Transferencia de Resultados de Investigación de la Universidad de Vigo pueden estructurarse en tres grandes áreas:

Área 1: la difusión, la promoción y mercadotecnia de la I+D+i de la Universidad de Vigo

Área 2: la valorización y protección de la tecnología de la universidad

Área 3: la transferencia de los resultados de la investigación de la universidad

También se cuenta con la oficina para la **Cooperación en Investigación y Desarrollo Tecnológico (OCIT) de la UJI** que se encarga de promover y gestionar las actividades de investigación y de innovación tecnológica en dos direcciones:

Fomentar la colaboración Universidad-Empresa a través de la conexión entre los conocimientos científicos y tecnológicos generados por los investigadores de la Universitat Jaume I y las necesidades de I+D+i de las empresas y organizaciones.

Facilitar la participación de los grupos de investigación en los programas públicos de financiación de actividades de I+D. Se puede consultar información detallada de su servicio en la página <http://www.uji.es/ocit/>

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

Como se ha planteado el programa de doctorado, la persona candidata 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 estudiantado.

En el caso de estancias cortas el/la 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 podrían otorgar las universidades (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 el alumnado.

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 estudiantes 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 el alumnado.

8. REVISIÓN, MEJORA Y RESULTADOS DEL PROGRAMA

8.1 SISTEMA DE GARANTÍA DE CALIDAD Y ESTIMACIÓN DE VALORES CUANTITATIVOS

SISTEMA DE GARANTÍA DE CALIDAD

Sistema de Garantía Interna de Calidad.

Las Universidades participantes aceptan seguir los procedimientos de un único Sistema de Garantía de Calidad. Se seguirá el Sistema de Garantía Interna de Calidad (SGIC) de los Programas de Doctorado de la Facultad de Ciencias 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_Garantía_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 **Subcomisión Interna de Calidad** nombrada por la Comisión de Coordinación Académica y que velará por la calidad de la docencia impartida y del doctorado en general. La Subcomisión Interna de Calidad, está compuesta por tres profesores, hombres o mujeres, de tres Universidades distintas y contará además con una representación del alumnado y otra del PAS. Uno de los tres profesores ejercerá de presidente de la comisión.

Con el fin asegurar la coordinación entre las universidades, la subcomisión interna de calidad realizará anualmente las siguientes tareas:

- Recogerá la información facilitada por el Sistema de Garantía Interna de Calidad (SGIC) de cada Universidad y los integrará en los procedimientos derivados del SGIC de los Programas de Doctorado de la Universidad Autónoma de Madrid
- Elaborará los indicadores de seguimiento y control utilizando datos unificados para todas las universidades participantes. En caso de ser necesario recabará información directamente para elaborar los indicadores de seguimiento y control de forma unificada.
- Enviar a la Comisión de Coordinación Académica anualmente un informe de seguimiento de la calidad, que será debatido en una reunión presencial de la Comisión de Coordinación Académica, donde están representadas todas las universidades que participan en el programa. En esa reunión se decidirán las acciones correctivas y se elaborará un plan de mejora. El cumplimiento del plan se evaluará al cabo de un año.

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 de seguimiento de la calidad del programa de doctorado y del plan de mejora.

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

El Manual del Sistema de Garantía Interna de Calidad de los Programas de Doctorado de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid, descrito en el apartado 8.1, define los procedimientos para la recogida y análisis de la información, y la especificación del modo en el cual se utilizará dicha información en la revisión y mejora del programa de doctorado, tanto la mejora enfocada al proceso de enseñanza-aprendizaje como la valoración de la actividad científica de doctorandas y doctorandos, docentes, investigadores e investigadoras implicados en el programa. Así, al menos, se recogerá y analizará la información relativa a:

- Perfil de estudiantes que acceden a estos estudios
- Desarrollo del Programa formativo: actividades formativas ofertadas
- Rendimiento del programa: tasa de graduación, producción científica de los doctores, porcentaje de tesis con Mención Internacional, porcentaje de Tesis con calificación Apto Cum Laude, duración media de los estudios, tasa de abandono.
- Recursos Humanos: porcentaje de directores y de tutores de tesis, cotutelas internacionales, producción científica del profesorado en los últimos 5 años con y sus colaboraciones internacionales
- Recursos materiales: financiación del programa, convenios específicos del programa, becas de movilidad, materiales específicos
- Inserción laboral de los egresados.

Procedimientos y mecanismos para realizar el seguimiento de egresados:

La estructura de nuestro doctorado transferirá a la persona candidata 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.

Se cuenta además con el Observatorio de Inserción Profesional y Asesoramiento Laboral (OPAL) de la Universidad de Valencia y las oficinas u observatorios de empleo de las demás universidades como servicios de asesoramiento en el proceso de seguimiento y análisis de la inserción profesional de doctorandos y doctorandas. Todo ello, orientado a conocer y compaginar las demandas del mercado laboral, el perfil de las personas egresadas y su formación universitaria.

Las distintas universidades participantes mantienen un contacto fluido con 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 que permita hacer un seguimiento de las personas egresadas 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 cada persona egresada puedan ir actualizado sus datos y su curriculum vitae. Desde la gestión del doctorado se solicitará una actualización anual de datos.
- Se tomarán acciones para fomentar los contactos entre 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 el gremio de egresados
- Se distribuirá información sobre ofertas de trabajo abiertas en empresas e instituciones académicas a nivel postdoctoral y relacionados con el perfil del personal egresado.
- Se realizarán anualmente encuestas dirigidas a 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 doctora o doctor, se incluirá en el informe anual de resultados un apartado en términos de inserción laboral y satisfacción con la formación. Dicho informe será trasladado a las Subcomisión Interna de Calidad que propondrá acciones de mejora a la Comisión de Coordinación Académica del programa de doctorado.

En la actualidad no se dispone de los datos completos de seguimiento de 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 23 que la realizaron en la Universidad Coordinadora (UAM). De 23, 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 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 que:

Previsión del porcentaje estudiantes egresados que consiguen ayudas para contratos post-doctorales:

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

Datos relativos a la empleabilidad de los estudiantes egresados:

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 en 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.