

## Vicerrectorado de Ordenación Académica

### DOCTORADO EN QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL, por la Universidad Autónoma de Madrid, U. Complutense de Madrid, U. de Barcelona, U. de Cantabria, U. de Extremadura, U. de les Illes Balears, U. de Murcia, U. de Oviedo, U. de Sevilla, U. de Vigo, U. del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, U. Jaume I y U. de València (Estudi General)

(Real Decreto 99/2011, de 28 de enero, por el que se regulan las enseñanzas oficiales de doctorado).

#### Contexto del título

##### Circunstancias que rodean al programa de doctorado:

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 mas 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.

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

## Vicerrectorado de Ordenación Académica

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.

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:

[http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1234886379182/contenidoFinal/Publicaciones\\_y\\_resultados.htm](http://www.uam.es/ss/Satellite/es/1234886379182/contenidoFinal/Publicaciones_y_resultados.htm)

[http://www.fguv.org/opal/index.asp?ra\\_id=267](http://www.fguv.org/opal/index.asp?ra_id=267)

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, desarrollar 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.

## Vicerrectorado de Ordenación Académica

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).

## Vicerrectorado de Ordenación Académica

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.

La mayor parte de nuestros estudiantes provienen de dos másteres: el "Máster en Química Teórica y Modelización Computacional" verificado positivamente (resolución 30/09/2010), en el que participan las Universidades Autónoma de Madrid, Universidad de Cantabria, Universidad de Extremadura, Universidad de las Islas Baleares, Universidad Jaume I, Universidad de Murcia, Universidad de Oviedo, Universidad de Santiago de Compostela, Universidad de Valencia, Universidad de Valladolid y Universidad de Vigo y al que han solicitado su adhesión las Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea y la Universidad de Salamanca y el "Máster Interuniversitario de Química Teórica y Computacional" verificado positivamente (Resolución 21/10/2009), en el que participan las Universidades Rovira y Virgili (coordinadora), Universidad de Barcelona, Universidad Autónoma de Barcelona y Universidad de Girona.

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 in 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

## Vicerrectorado de Ordenación Académica

reconoce también la colaboración con las 46 universidades del consorcio indicado anteriormente.

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).

Ese núcleo de universidades harán 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).

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

## Vicerrectorado de Ordenación Académica

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](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://edocorator.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 Académica del programa** 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 de-

## Vicerrectorado de Ordenación Académica

berá ser dirigida y justificada ante la Comisión Académica responsable del programa, que se pronunciará sobre la procedencia de acceder a lo solicitado por el doctorando. 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.

**Para más información puede dirigirse a:**

Escuela de Doctorado de la Universidad de Cantabria (EDUC)

Edificio Tres Torres "Casa del Estudiante". Torre C, planta -1

942 20 12 96 / [escueladoctorado@unican.es](mailto:escueladoctorado@unican.es)