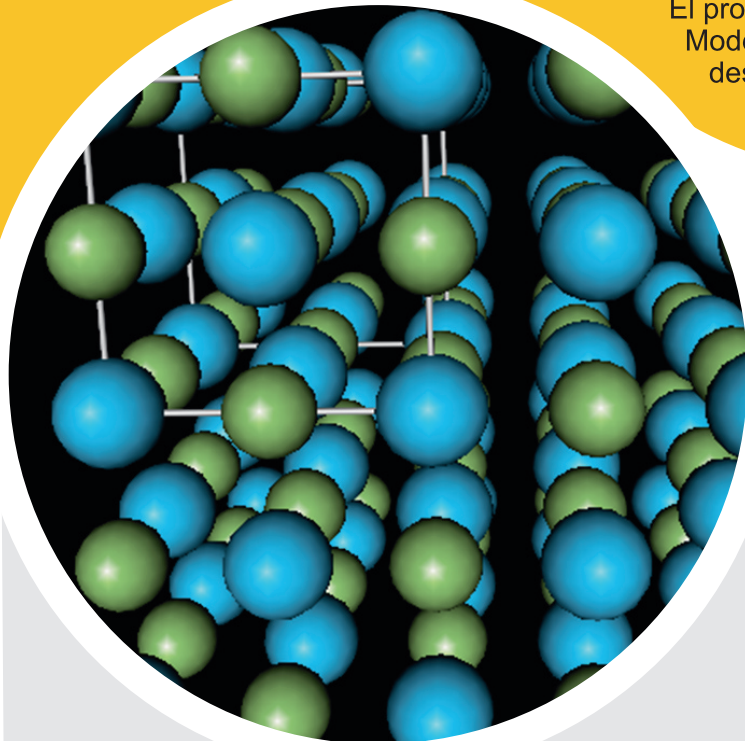


# DOCTORADO EN QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL

El programa de doctorado interuniversitario en Química Teórica y Modelización Computacional ofrece la preparación en el uso y desarrollo de los métodos de Química Teórica, en áreas fundamentales de Química, Física, Ciencia de Materiales, Nanociencia y Bioquímica.



• **Formación Transversal e interdisciplinariedad:** La EDUC desarrolla acciones destinadas a una formación transversal común a todos los programas de doctorado que refuerzan la interdisciplinariedad

<http://www.unican.es/Centros/Escuela-de-Doctorado/actividades-transversales/>

## PERFIL DE ACCESO

La vía de acceso recomendada para el programa de doctorado es la realización de un grado en Química, Física o Ciencia de los Materiales y la posterior realización del Máster oficial en Química Teórica y Modelización Computacional u otro equivalente. En aquellos casos en que el estudiante haya realizado un grado o un máster distinto a los indicados, la comisión académica analizará cada caso concreto.

## SALIDAS PROFESIONALES

Investigación en Química Teórica, Física de la Materia Condensada, Bioquímica, etc... Trabajo como experto avanzado en industrias con departamentos de innovación de sectores como el farmacéutico, petroquímico, de diseño de nuevos materiales, etc.

## INFORMACIÓN BÁSICA

- **Calendario:** Se puede seguir a tiempo completo (programa de 3 años) o a tiempo parcial (5 años) de formación y realización de Tesis.
- **Instituciones responsables del título:** Universidades Autónoma de Madrid, Cantabria, Barcelona, Complutense de Madrid, Extremadura, Illes Balears, Jaume I de Castellón, Murcia, Oviedo, País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, Sevilla, València y Vigo.
- **Estado de impartición:** Se imparte desde octubre de 2014.
- **Lugar de impartición:** Escuela de Doctorado de la Universidad de Cantabria (EDUC), Dpto. de Química de la Universidad Autónoma de Madrid, Dpto. de Química Física de la Universidad de Barcelona, Escuela de Doctorado de la Universidad de Cantabria, Dpto. de Química Física I de la Universidad Complutense de Madrid, Dpto. de Ingeniería Química y Química Física de la Universidad de Extremadura, Dpto. de Química de la Universitat de les Illes Balears, Dpto. de Química Física y Analítica de la Universitat Jaume I de Castellón, Dpto. de Química Física de la Universidad de Murcia, Dpto. de Química Física y Analítica de la Universidad de Oviedo, Dpto. de Ciencia y Tecnología de Polímeros de la Universidad del País Vasco/Euskal Herrko Unibertsitatea, Dpto. de Química Física de la Universidad de Sevilla y Facultad de Química de la Universidad de Vigo.
- **Idiomas habitualmente utilizados:** castellano e inglés.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{R_A}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{R_B}^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \right]$$

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S_{AB}}} (\phi_A + \phi_B)$$



**Coordinador/a:** Pablo Garcia Fernández (UC)  
[garciafp@unican.es](mailto:garciafp@unican.es)  
**Secretaría de la Escuela de Doctorado:**  
[escueladoctorado@unican.es](mailto:escueladoctorado@unican.es)

**Instituciones relacionadas:** Dpto. de Química Física I de la Universidad Complutense de Madrid, Dpto. de Ingeniería Química y Química Física de la Universidad de Extremadura, Dpto. de Química de la Universitat de les Illes Balears, Dpto. de Química Física y Analítica de la Universitat Jaume I de Castellón, Dpto. de Química Física de la Univ. de Murcia. Dpto. de Química Física y Analítica de la Univ. de Oviedo, Dpto. de Ciencia y Tecnología de Polímeros de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, Dpto. de Química Física de la Universidad de Sevilla y Fac. de Química de la Univ. de Vigo.



## DESCRIPCIÓN

El programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional tiene como fin último preparar investigadores líderes en el uso y desarrollo de los métodos de Química Teórica capaces de trabajar áreas fundamentales de Química, Física, Ciencia de Materiales, Nanociencia y Bioquímica. Igualmente, producir personal innovador en industrias tales como farmacéuticas, petroquímicas, computacionales o industrias de nuevos materiales.

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

## EJE TEMÁTICO FUNDAMENTAL

La modelización computacional a nivel molecular en Química-Física, Física Molecular, Bioquímica y Nuevos Materiales.

## LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

El eje temático o línea de investigación principal que articula el programa se vertebra en cinco líneas de investigación:

- 1<sup>a</sup> Inestabilidades Jahn-Teller y pseudo Jahn-Teller de impurezas de metales en transición en materiales aislantes: origen de los desplazamientos "on-center" y "off-center".
- 2<sup>a</sup> Inestabilidades en materiales porosos.
- 3<sup>a</sup> Origen del color en minerales con impurezas de metales de transición.
- 4<sup>a</sup> Estudios computacionales de materiales dieléctricos, ferroeléctricos y piezoeléctricos.
- 5<sup>a</sup> Simulaciones de interfaces.

## MÁS INFORMACIÓN EN:

Puede encontrarse información complementaria en la siguiente dirección electrónica:

<http://www.doctoradouniversidaddecantabria.com>

