

IMPRESO SOLICITUD PARA VERIFICACIÓN DE TÍTULOS OFICIALES

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

De conformidad con el Real Decreto Real Decreto 99/2011, de 28 de enero, por el que se regulan los Programas de Doctorado Oficiales

UNIVERSIDAD SOLICITANTE	CENTRO	CÓDIGO CENTRO
Universidad Autónoma de Madrid	Facultad de Ciencias (MADRID)	28027060
NIVEL	DENOMINACIÓN CORTA	
Doctorado	Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling	
DENOMINACIÓN ESPECÍFICA		
Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling por la Universidad Autónoma de Madrid; la Universidad Complutense de Madrid; la Universidad Jaume I de Castellón; la Universidad de Barcelona; la Universidad de Cantabria; la Universidad de Extremadura; la Universidad de Murcia; la Universidad de Oviedo; la Universidad de Sevilla; la Universidad de Vigo; la Universidad de las Illes Balears; la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea y la Universitat de València (Estudi General)		
CONJUNTO	CONVENIO	
Nacional	CONVENIO DE COLABORACIÓN ENTRE LAS UNIVERSIDADES PARTICIPANTES PARA LA ORGANIZACIÓN Y DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS CONJUNTAS CONDUCENTES A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO OFICIAL DE DOCTOR O DOCTORA	
UNIVERSIDADES PARTICIPANTES	CENTRO	CÓDIGO CENTRO
Universidad Complutense de Madrid	Facultad de Ciencias Químicas (MADRID)	28027837
Universidad de Barcelona	Escuela de Doctorado de la Universidad de Barcelona (BARCELONA)	08072152
Universidad de Cantabria	Escuela de Doctorado (EDUC) (SANTANDER)	39014543
Universidad de Extremadura	Facultad de Ciencias (BADAJOZ)	06005329
Universidad de las Illes Balears	Facultad de Ciencias (PALMA)	07006071
Universidad Jaume I de Castellón	Escuela de Doctorado de la Universidad Jaume I de Castellón (CASTELLÓN DE LA PLANA/ CASTELLÓ DE LA PLANA)	12060026
Universidad de Murcia	Facultad de Química (MURCIA)	30010218
Universidad de Oviedo	Centro Internacional de Postgrado (OVIEDO)	33024502
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea	Facultad de Ciencias Químicas (DONOSTIA-SAN SEBASTIÁN)	20006274
Universidad de Sevilla	Facultad de Química (SEVILLA)	41008635
Universitat de València (Estudi General)	Instituto Universitario de Ciencia Molecular (BURJASSOT)	46035291
Universidad de Vigo	Facultad de Química (VIGO)	36020556
SOLICITANTE		
NOMBRE Y APELLIDOS	CARGO	
Manuel Alcamí Pertejo	Catedrático de Química Física. Universidad Autónoma de Madrid.	

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

1. DESCRIPCIÓN DEL TÍTULO

1.1. DATOS BÁSICOS

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

1.2 CONTEXTO

CIRCUNSTANCIAS QUE RODEAN AL PROGRAMA DE DOCTORADO
<p>La modelización computacional a nivel molecular se ha 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 desde el campo de la industria, donde cada vez mas empresas ven en la modelización a escala molecular una herramienta que permite avanzar más rápidamente en la síntesis de nuevas sustancias funcionales o nuevos materiales, además de abaratar costes en la obtención de los mismos y en el estudio de sus propiedades. El doctorado que se presenta permite formar personas expertas en ésta área que sean capaces de entender los métodos, desarrollar nuevas metodologías, conocer en detalle su rango de aplicación, interpretar los resultados y a aplicar las técnicas de modelización a sistemas de interés.</p> <p>El programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling tiene como fin último preparar investigadores e investigadoras líderes en el uso y desarrollo de los métodos de Química Teórica capaces de trabajar áreas fundamentales de química,</p>

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.

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.

El programa conjunto de doctorado en "Química Teórica y Modelización Computacional" recibió la verificación positiva en 2009 (resolución 15 de Julio de 2009 y corrección de 14 de octubre de 2009) y en él participan las universidades Autónoma de Madrid (coordinadora), Cantabria, Complutense de Madrid, Extremadura, Granada, Illes Balears, Jaime I de Castellón, Murcia, Oviedo, País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, Sevilla, Valencia y Vigo. Como tal programa de doctorado interuniversitario recibió en Julio de 2011 la mención hacia la excelencia por parte del Ministerio de Educación con una puntuación

global ponderada de 96/100 (Referencia MEE2011-0153). Dicho doctorado provenía de un doctorado interuniversitario que había recibido la mención de calidad, desde la creación de esta mención, la última mención obtenida fue coordinada por la Universidad del País Vasco (ref MCD2003-00675).

El programa conjunto de doctorado que se presenta supone una modificación del anterior ya que se adapta a la normativa actual (Real Decreto 99/2011) 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 Masters: el "Master en Química Teórica y Modelización Computacional" verificado positivamente (resolución 30/09/2010), en el que participan las Universidades Autónoma de Madrid, Universidad de Cantabria, Universidad de Extremadura, Universidad de las Islas Baleares, Universidad Jaume I, Universidad de Murcia, Universidad de Oviedo, Universidad de Santiago de Compostela, Universidad de Valencia, Universidad de Valladolid y Universidad de Vigo y al que han solicitado su adhesión las Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea y la Universidad de Salamanca y el "Master Interuniversitario de Química Teórica y Computacional" verificado positivamente (Resolución 21/10/2009), en el que participan las Universidades Rovira y Virgili (coordinadora), Universidad de Barcelona, Universidad Autónoma de Barcelona y Universidad de Girona.

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

Posteriormente, en 2010, dicho máster fue reconocido como Master Erasmus Mundus, actuando como Universidad coordinadora la Universidad Autónoma de Madrid y como socios las siguientes Universidades: University of Groningen (Holanda), Katholieke Universiteit/Leuven, (Belgica), Università degli Studi di Perugia (Italia), Universidade do Porto (Portugal), Université Paul Sabatier - Toulouse III (Francia) y la Universitat de Valencia (España). En dicho máster se reconoce también la colaboración con las 46 universidades del consorcio indicado anteriormente.

En la actualidad se está en proceso de solicitar un doctorado europeo Erasmus Mundus en 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), Bristol University (Inglaterra), Universität Stuttgart (Alemania), Universität Bonn (Alemania) y Universität Wien (Austria). Ese núcleo de universidades harán de universidades "pivote" par el resto de Universidades implicadas en el doctorado. Debido al creciente interés de la modelización en la industria en esta solicitud del doctorado Erasmus Mundus participan como "associated partners" una serie de empresas que se comprometen a participar en distintas actividades formativas a colaborar en los proyectos de investigación que desarrollen algunos de los doctorandos e incluso a codirigir tesis. Entre estas empresas destacan IBM, Lilly, BASF, Matgas (grupo Air Liquide) y centros de supercomputación europeos como Barcelona Supercomputing Center -BSC-, CINECA en Italia o el High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS).

En cuanto a la integración en una **Escuela Doctoral**, consideramos que para dar mayor flexibilidad en la gestión y una mejor interacción con programas de doctorado afines (colaboraciones que se establecen normalmente a nivel local en cada Universidad), no se creará una Escuela Doctoral propia sino que se integrará el doctorado dentro de las distintas Escuelas Doctorales que se están creando a nivel local en las respectivas Universidades. En consecuencia, el programa estará inscrito en una o varias 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.

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**, 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 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
023	Universidad Autónoma de Madrid
010	Universidad Complutense de Madrid
004	Universidad de Barcelona
016	Universidad de Cantabria
002	Universidad de Extremadura
003	Universidad de las Illes Balears

040	Universidad Jaume I de Castellón
012	Universidad de Murcia
013	Universidad de Oviedo
020	Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea
017	Universidad de Sevilla
018	Universitat de València (Estudi General)
038	Universidad de Vigo

1.3. Universidad Autónoma de Madrid

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Facultad de Ciencias (MADRID)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
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 (MADRID)

1.3.2. Facultad de Ciencias Químicas (MADRID)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.ucm.es/bouc/pdf/902.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 Barcelona

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
08072152	Escuela de Doctorado de la Universidad de Barcelona (BARCELONA)

1.3.2. Escuela de Doctorado de la Universidad de Barcelona (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 de Cantabria

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Escuela de Doctorado (EDUC) (SANTANDER)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

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

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Facultad de Ciencias (BADAJOZ)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
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 de las Illes Balears

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Facultad de Ciencias (PALMA)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
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. Universidad Jaime I de Castellón

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

LISTADO DE CENTROS	
CÓDIGO	CENTRO
12060026	Escuela de Doctorado de la Universidad Jaime I de Castellón (CASTELLÓN DE LA PLANA/CASTELLÓ DE LA PLANA)

1.3.2. Escuela de Doctorado de la Universidad Jaime I de Castellón (CASTELLÓN DE LA PLANA/CASTELLÓ DE LA PLANA)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

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

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Facultad de Química (MURCIA)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

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

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Centro Internacional de Postgrado (OVIEDO)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
5	5	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://cei.uniovi.es/c/document_library/get_file?uuid=c8f1b0ed-155e-47e4-84b1-c36b3c3c76d4&groupId=49472		
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 (DONOSTIA-SAN SEBASTIÁN)

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

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://www.ikasketak.ehu.es/p266-shprogct/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 (SEVILLA)

1.3.2. Facultad de Química (SEVILLA)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
3	3	
NORMAS DE PERMANENCIA		
http://bous.us.es/2011/numero-4/pdf/archivo-12.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. Universitat de València (Estudi General)

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Instituto Universitario de Ciencia Molecular (BURJASSOT)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
6	6	
NORMAS DE PERMANENCIA		
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

No	No	No
ITALIANO	OTRAS	
No	No	

1.3. Universidad de Vigo

1.3.1. CENTROS EN LOS QUE SE IMPARTE

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

1.3.2. Facultad de Química (VIGO)

1.3.2.1. Datos asociados al centro

PLAZAS DE NUEVO INGRESO OFERTADAS		
PRIMER AÑO IMPLANTACIÓN	SEGUNDO AÑO IMPLANTACIÓN	
5	5	
NORMAS DE PERMANENCIA		
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	

1.4 COLABORACIONES

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

2. COMPETENCIAS

2.1 COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES
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

CE01 - Aplicar la Química Teórica y Computacional a la resolución de problemas en diversas ramas de la Ciencia como son la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.

CE02 - Capacidad de modelizar un proceso químico empleando los paquetes informáticos más comunes.

CE03 - Capacidad de emplear la programación como herramienta para solucionar problemas químicos.

CE04 - Capacidad de escribir artículos científicos en su área de especialización en Química Teórica y Computacional.

CE05 - Capacidad de conocer y relacionarse con los principales grupos que trabajan en Europa en Química Teórica y Computacional

CE06 - Ser capaz de concebir, diseñar, poner en práctica y adoptar un proceso sustancial de investigación con seriedad académica y rigor científico.

CE07. - Capacidad de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

3. ACCESO Y ADMISIÓN DE ESTUDIANTES

3.1 SISTEMAS DE INFORMACIÓN PREVIO

Perfil de ingreso recomendado o idóneo.

Se recomienda que los estudiantes que accedan al doctorado en su periodo de investigación, idealmente, hayan cursado y por ende adquirido las capacidades, destrezas y conocimientos que otorga el Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional/ Theoretical Chemistry and Computational. 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 Académica del doctorado. El lenguaje a emplear, en el periodo formativo que otorga el máster en Química Teórica y Modelización Computacional/ Theoretical Chemistry and Computational, es el inglés con nivel B2. Por lo tanto, en el periodo de investigación es muy recomendable poseer suficiencia en esta lengua.

Mecanismos de información previos a la matrícula y orientación de estudiantes de nuevo ingreso.

Toda persona interesada en el programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional podrá acceder a la información relativa a requisitos de acceso y admisión a través de la página web oficial de 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 de la presente memoria.

Es de destacar que debido al carácter interuniversitario del doctorado y su conexión con iniciativas a nivel internacional (Erasmus Mundus Doctorate solicitado y Erasmus Mundus Master como parte formativa, ya concedido), los programas de doctorado y master 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 los estudiantes 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 master asociado, a través de distintas páginas web. Actualmente se están utilizando:

- Simply Hired:
<http://www.simplyhired.com/a/jobs/list/q-computational+chemist>
- European Campus Platform:
<http://master.europecampus.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/>

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 a Máster de acuerdo con lo establecido en el artículo 16 del Real Decreto 1393/2007, de 29 de octubre y haber superado un mínimo de 300 créditos ECTS en el conjunto de estudios universitarios oficiales, de los que, al menos 60, habrán de ser de nivel de Máster.
- Estar en posesión de un título oficial español de Graduado o Graduada, cuya duración, conforme a normas de derecho comunitario, sea de al menos 300 créditos ECTS. Dichos titulados deberán cursar con carácter obligatorio los complementos de formación, salvo que el plan de estudios del correspondiente título de grado incluya créditos de formación en investigación, equivalentes en valor formativo a los créditos en investigación procedentes de estudios de Máster.
- Estar en posesión de un título obtenido conforme a sistemas educativos extranjeros, sin necesidad de su homologación, previa comprobación por la universidad de que éste acredita un nivel de formación equivalente a la del título oficial español de Máster Universitario y que faculta en el país expedidor

del título para el acceso a estudios de doctorado. Esta admisión no implicará, en ningún caso, la homologación del título previo del que esté en posesión 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

Estudiantes que cumplan los requisitos detallados anteriormente, podrán ser admitidos en el programa de Doctorado. La **Comisión Académica del Programa de Doctorado**, cuya composición se detalla en el apartado 5.2, en "Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling", analizará las solicitudes de admisión valorando los siguientes aspectos y méritos:

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

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 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 master en

"Química Teórica y Modelización Computacional", el master "Química Teórica y Computacional" o masters en las áreas de Química, Física, Ciencias de los Materiales con un importante contenido teórico y orientación investigadora. Egresados de los dos máster 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 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 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 Autónoma de Madrid	Doctor en Programa Oficial de Posgrado Europeo en química teórica y modelización computacional
Universidad de Barcelona	Programa Oficial de Doctorado en Química Teórica y Computacional
Universidad Jaime I de Castellón	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en Theoretical Chemistry and Computational Modelling

Universidad de Murcia	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en química teórica y modelización computacional
Universidad de Oviedo	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en química teórica y modelización computacional
Universidad de Valencia (Estudi General)	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en química teórica y computacional
Universidad de Vigo	Doctor en Programa Oficial de Posgrado en química teórica y modelización computacional

Últimos Cursos:

CURSO	Nº Total estudiantes	Nº Total estudiantes que provengan de otros países
Año 1	25.0	7.0
Año 2	27.0	7.0
Año 3	18.0	7.0
Año 4	16.0	7.0
Año 5	15.0	7.0

3.4 COMPLEMENTOS DE FORMACIÓN

La vía de acceso recomendada para el programa de doctorado es la realización de un grado en Química, Física o Ciencia de Materiales y la posterior realización de uno de los dos masters oficiales siguientes: el Máster en Química Teórica y Modelización Computacional o el master en Química Teórica y Computacional.

En aquellos casos en que se haya realizado un grado o un master distinto a los indicados la Comisión Académica podrá establecer complementos de formación que serán, en cualquier caso, asignaturas del primer año de los citados masters hasta un máximo de 30 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.

Aquellos casos en los que la vía de acceso sea un grado cuya duración sea de al menos 300 ECTS (farmacia, medicina, odontología, veterinaria y arquitectura) 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 estará encargado de sugerir los complementos requeridos y será la Comisión Académica del doctorado la que finalmente decida los complementos de formación a realizar por cada estudiante a la vista de su historial académico previo.

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

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

Estas asignaturas se podrán seguir a nivel local o en cursos intensivos organizados de forma conjunta por las Universidades participantes. Su realización, pre o post matriculación en el doctorado, dependerá de las exigencias de cada Universidad.

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 semana, durante el período lectivo, un seminario en el cual un investigador o una 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 10 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, CA05, CE01 y CE05.</p>		
4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN		
<p>La tutora o el tutor de cada estudiante de doctorado incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de asistencia a seminarios. Este documento se remitirá a la Comisión Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades del doctorando o de la doctoranda.</p>		

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

4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

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

ACTIVIDAD: Asistencia a cursos especializados

4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS	80
---------------------	-------------	----

DESCRIPCIÓN

El número de horas es indicativo.

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, CA06, CE01, CE02 y CE05.

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 la 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 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

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		
<p>El número de horas es indicativo.</p> <p>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.</p> <p>El congreso debe ser preferentemente de carácter internacional y de alto prestigio en el campo de investigación del doctorando o de la 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.</p> <p>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.</p> <p>Esta actividad servirá para desarrollar las competencias: CB11, CB14, CB15, CB16, CA05, CA06, CE01, CE02, CE05 y CE07.</p>		
4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN		
<p>La tutora o el 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 Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades de la doctoranda o del doctorando.</p>		
4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD		
<p>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.</p>		
ACTIVIDAD: Preparación y presentación de dos seminarios formales.		
4.1.1 DATOS BÁSICOS	Nº DE HORAS	50
DESCRIPCIÓN		
<p>La persona candidata al doctorado, tanto a tiempo parcial como completo, deberá preparar y presentar dos seminarios con carácter formal.</p> <p>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</p>		

utilizar en su exposición de tesis, es decir, una parte de su exposición será en castellano y otra en una lengua de la Unión Europea, regularmente, inglés.

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 el estudiante sea capaz de demostrar su capacidad de comunicación con la comunidad académica y científica y con la sociedad en general acerca de su trabajo de tesis en modo expositivo e idioma inglés (por lo general, siendo también aceptada otra lengua de la comunidad europea); que participe de la crítica y defensa intelectual de soluciones; que demuestre su capacidad de concebir, diseñar, poner en práctica y adoptar un proceso sustancial de investigación con seriedad académica y rigor científico y que demuestre capacidad de fomentar en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos (competencias CB15, CA06, CE06 y CE07).

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

El tutor o la tutora incluirá en el Documento de Actividades del Doctorando todos los datos de presentación de seminarios realizados por la persona candidata a doctor o doctora. Este documento se remitirá a la Comisión 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 la 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 un Erasmus Mundus Join Doctorate) 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, CA06, CE01, CE02, CE05 y CE07.

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, entiéndase, presentación realizada e informe de quienes le evaluaron, se recogerá en su Documento de Actividades. Dicho documento será remitido por el tutor o la tutora a la Comisión Académica del programa de doctorado y se incorporarán los datos al registro de actividades del doctorando o de la doctoranda.

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, CA06, CE04 y CE06.

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

La tutora o el 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 Académica del programa de doctorado que incorporará los datos al registro de actividades de la doctoranda o del doctorando.

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, CA05, CE05 y CE07.

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.

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

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

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, 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, CB16, CE01 y CE07.

4.1.2 PROCEDIMIENTO DE ADAPTACIÓN

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

4.1.3 ACTUACIONES DE MOVILIDAD

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

5. ORGANIZACIÓN DEL PROGRAMA

5.1 SUPERVISIÓN DE TESIS

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

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

Relación de actividades previstas que fomenten la supervisión múltiple en casos justificados académicamente (co-dirección de tesis por parte de un director experimentado y un director novel, co-tutela de tesis interdisciplinarias, 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 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 la labor de dirección.

Dado el carácter internacional del doctorado existe un Comité Internacional encargado de la coordinación entre países, de la realización de actividades conjuntas (como por ejemplo los workshops internacionales o los cursos de especialización), de 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) y la normativa del programa Erasmus Mundus.

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.

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

5.2 SEGUIMIENTO DEL DOCTORANDO

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

La **Comisión Académica del Programa de Doctorado** estará compuesta por un profesor 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 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-1@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 el profesorado de la misma y serán avalados por la Universidad respectiva. El/la Coordinador/a del Programa de Doctorado estará designado por acuerdo de los Rectores de las Universidades participantes. La Coordinadora o Coordinador del Programa de Doctorado actúa como Presidenta o Presidente de la Comisión Académica. La Universidad del presidente actúa como Coordinadora del Programa de Doctorado Interuniversitario. En los procedimientos generales de desarrollo del Programa se siguen los acuerdos firmados en el correspondiente convenio por los Rectores de todas las Universidades participante.

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

Una vez admitido un estudiante en el programa de doctorado, a la vista de la documentación aportada, en especial su CV, su proyecto de trabajo y si dicho proyecto está asociado a alguna beca de investigación. La Comisión Académica del doctorado asignará a cada doctorando y doctoranda:

- En el momento de admisión al programa: un tutor o tutora, que será doctor, con acreditada experiencia investigadora.

- 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 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.

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

- Si doctorando o doctoranda no está contento con la labor realizada en la supervisión. Habiendo agotado toda instancia de solución, hablará con la coordinación del programa, quién llevará la solicitud a la Comisión Académica del doctorado.
- Si alguna de las partes firmantes incumple el documento que establece las funciones de supervisión o algún convenio de confidencialidad elaborado entre director/a y doctorando/a.

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

Todas las actividades formativas realizadas se registrarán en un documento 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 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 (**Registro de Actividades del/ de la Doctorando/a**) donde se recopilarán:

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

- El plan de investigación.
- Copia de todas las resoluciones emitidas por la Comisión Académica que afecten al doctorando 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 la doctoranda en cada periodo así como también los justificantes de las mismas.
- 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 para la valoración anual del Plan de investigación y el registro de actividades del doctorando:

La Comisión Académica evaluará cada curso académico el plan de investigación y el Documento de Actividades. 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.

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

El plan puede ser modificado y dicho cambio deberá estar avalado por el tutor o tutora y la directora o director. Asimismo, el documento de actividades debe ser revisado regularmente por estas dos figuras.

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

La realización de estancias nacionales e internacionales deberán 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-tutelas deberán seguir el procedimiento establecido por cada una de las universidades implicadas en el programa.

5.3 NORMATIVA PARA LA PRESENTACIÓN Y LECTURA DE TESIS DOCTORALES

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

Universidad Autónoma de Madrid

<http://www.uam.es/procedimientotribunaldefensatesis>

Universidad de Barcelona

http://www.ub.edu/web/ub/ca/estudis/oferta_formativa/doctorat/normativa/normativa.html

Universidad de Cantabria

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

Universidad Complutense

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

Universidad de Extremadura

http://www.unex.es/organizacion/servicios/servicio_becas/funciones/tercer_ciclo/normas-operativas-o-de-procedimiento-para-el-tramite-de-tesis-doctorales

Universidad de las Illes Balears

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

Universidad Jaime I de Castellón

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

Universidad de Murcia

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

Universidad de Oviedo

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

Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea

http://www.ikasketak.ehu.es/p266-shtesdct/es/contenidos/informacion/matricula_tesis/es_matr_def/matricula_defensa_tesis_doctoral.html

Universidad de Sevilla

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

Universidad de Valencia

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

Universidad de Vigo

http://webs.uvigo.es/vicprof/images/documentos/normativas/Uvigo/modificacion_reglamento_estudios_posgrao2.pdf

En términos generales podemos decir que:

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

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

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

La defensa de la tesis ha de ser evaluada en la universidad española en la que cada estudiante 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 universidad en la que se defienda la tesis garantizará la publicidad de la tesis doctoral finalizada a fin de que durante el proceso de evaluación, y con carácter previo al acto de defensa, otras personas puedan remitir observaciones sobre su contenido.

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

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

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

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

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 Doctora o Doctor podrá incluir en su anverso la mención «Doctor o Doctora Internacional», siempre que:

- Durante el periodo de formación necesario para la obtención del título el doctorando o la doctoranda 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 la persona que dirige, autorizadas por la Comisión Académica, y recogidas en el documento de actividades.
- 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 o expertas doctoras pertenecientes a alguna institución de educación superior o instituto de investigación no española.
- Que al menos una experta o un experto perteneciente a alguna institución de educación superior o centro de investigación no española, con el título de doctora o doctor, y distinto de la persona 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.
04	Química Organometálica Computacional.

05	Bioquímica Computacional.
06	Procesos Inducidos por Láseres.
07	Sólidos y Superficies.
08	Estudio de Nuevos Materiales.

Equipos de investigación:

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

Ver anexo

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

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

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

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

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

La **Universidad Complutense** contabiliza por dirección de 3 a 6 Trabajos Fin de Máster 10 horas si son trabajos de 6 créditos ECTS, 20 horas si son de 7 a 12 ECTS, 30 horas si son de 13 a 18 o 40 horas si son 19 o más créditos 4, hasta un máximo de 40 horas. Co-tutela de prácticas externas en grupos de 6 a 12 estudiantes, o más si así lo señala la memoria verificada, que contabiliza como 5 horas si son de 6 créditos y como 10 horas si son de 12 o más créditos. En cualquier caso, la suma de la dedicación a estas labores de dirección de trabajos y de co-tutela de prácticas no puede superar las 45 horas.

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

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

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

7. RECURSOS MATERIALES Y SERVICIOS

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

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

- Aulas de propósito general dotadas con: pizarras, ordenador, video proyector y conexión física a internet.
 - Para la realización de seminarios entre distintas universidades el programa cuenta con un aula virtual (https://uam.adobeconnect.com/_a905201578/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:
 - En la universidad coordinadora (UAM) se cuenta con un aula de simulación asociada al Centro de Computación Científica (<https://www.ccc.uam.es/>) que cuenta con software informático específico (principales programas de simulación y visualización en química y física), posibilidad de acceso remoto, sistema de ejecución de trabajos en colas, acceso a ordenadores de mayor potencia en las instalaciones del Centro de Computación Científica. Ese aula se usa presencial o remotamente en los cursos asociados al doctorado.
 - En el resto de universidades asociadas se cuenta con aulas de informática y máquinas de cálculo con acceso a los principales programas
 - Todo estudiante del programa de doctorado tienen acceso a revistas electrónicas a través de la base “web of knowledge” del FECYT.
 - En su esfuerzo por garantizar la accesibilidad de aquellas personas con discapacidad, las universidades cuentan además con: rampas de acceso, baños y servicios adaptados, plazas de parking reservadas y red inalámbrica accesible. De hecho en el doctorado ya se tiene experiencia con casos extremos como es el de un estudiante con ceguera total, que realizó el período formativo (master) en el programa y está actualmente finalizando el doctorado. La experiencia con este estudiante ha supuesto la adaptación de los medios informáticos a estudiantes con dificultades visuales.
 - En cuanto a bibliotecas, cada universidad dispone 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.
- Todo estudiante del programa doctorado para realizar su labor de investigación dispone de:
- Un puesto de trabajo en su universidad dotadas con mobiliario, computador personal con software generales y específicos, teléfono y conexión a internet.

- Acceso a recursos de cálculo a diferentes niveles:

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

- El Software necesario para realizar su tesis doctoral

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

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 APOTC (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_Garantia_de_Calidad.htm

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

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

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

Mecanismos y procedimientos que aseguren la coordinación entre las universidades participantes.

Dada su naturaleza interuniversitaria, este programa cuenta con una **Subcomisión Interna de Calidad** nombrada por la Comisión Académica. La Subcomisión Interna de Calidad, está compuesta por tres profesores, sean hombres o mujeres, de tres Universidades distintas y contará además con una representación del alumnado y otra del PAS. Velará por la calidad en la docencia impartida y en el doctorado en general. Integrará la información facilitada por el Sistema de Garantía Interna de Calidad (SGIC) de cada Universidad y empleando los procedimientos derivados del SGIC de los Programas de Doctorado de la Universidad Autónoma de Madrid elaborará los indicadores de seguimiento y control y el informe anual de seguimiento de la calidad que servirá de base a las acciones correctivas que tome la Comisión Académica del Doctorado. El responsable actual de la Subcomisión Interna de Calidad del programa es el profesor Angel Martín Pendás de la Universidad de Oviedo.

Además, el programa de doctorado cuenta con personal de gestión propio que realizará las siguientes tareas:

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

TASA DE GRADUACIÓN %	TASA DE ABANDONO %
97	3
TASA DE EFICIENCIA %	
100	
TASA	VALOR %
No existen datos	
JUSTIFICACIÓN DE LOS INDICADORES PROPUESTOS	

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

Tasa de graduación:

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

Tasa de abandono:

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

Tasa de eficiencia:

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

8.2 PROCEDIMIENTO GENERAL PARA VALORAR EL PROCESO Y LOS RESULTADOS

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.

Las distintas universidades participantes mantienen un contacto fluido con egresados y egresadas 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 egresadas y egresados 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 los estudiantes egresados (grupos en redes sociales y listas de distribución de correo).
- Se realizará un boletín de noticias como medio eficiente de comunicación donde se difundirán noticias y actividades relacionadas con la Química Teórica de interés para egresados
- Se distribuirá información sobre ofertas de trabajos abiertas en empresas e instituciones académicas a nivel postdoctoral y relacionados con el perfil de nuestro 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 Comisión Interna de Calidad que propondrá acciones de mejora a la Comisión Académica del programa de doctorado.

En la actualidad no se dispone de los datos completos de seguimiento de 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 postdoctorales:

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.

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

9. PERSONAS ASOCIADAS A LA SOLICITUD

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

manuel.alcami@uam.es	645837640	914975238	Catedrático de Química Física. Universidad Autónoma de Madrid.
----------------------	-----------	-----------	---

BOBROBOR

ANEXOS : APARTADO 1

Nombre : CONVENIO blanco y negro.pdf

HASH MD5 : 25c142cc6accbd474671d56365210ab

Tamaño : 1173702

CONVENIO blanco y negro.pdf

BOLETÍN OFICIAL DEL ESTADO

EQUIPOS Y PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

Equipo de Investigación	Profesores	Tesis 5 años	Año último sexenio	Proyecto
Estructura Molecular y Reactividad Química	Jesus Maria Ugalde Uribe-Etxebarria	3	2011	Descripción Molecular de Disoluciones Conteniendo Iones Metálicos: de la Hidratación a la Complejación en Cationes Radioactivos y Fármacos Antitumorales Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Referencia: CTQ2011-25932. Duración: 01/01/2012 - 31/12/2014. Instituciones Participantes: Universidad de Sevilla. Número de Investigadores participantes: 7
	Manuel Yañez Montero	2	2006	
	Enrique Sánchez Marcos	2	2010	
Desarrollo de Métodos de Simulación en Química	Francisco Javier Luque Garriga	6	2007	Desarrollo e Implementación de Métodos quimicocuanticos para el estudio de sistemas grandes. Aplicaciones al almacenamiento de hidrogeno sobre nanotubos de carbonoygrafenos. Entidad financiadora: M.E.C.-D.G.I.-S.E.U.I. Referencia: CTQ2010-19738/BQU. Duración: 2011– 2013. Instituciones Participantes: U. Valencia, U. Módena, NTNU. Número de Investigadores participantes: 6
	Ricardo A. Mosquera Castro	2	2005	
	Ignacio José Nebot Gil	1	2004	
Estados Excitados y Fotoquímica	Enrique Ortí Guillén	3	2000	Molecular Astrophysics: the Herschel and ALMA era. Entidad financiadora: Dirección General de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. Referencia: Proyecto CONSOLIDER CSD2009-00038. Duración: 2010 - 2014. Instituciones Participantes: Universidad de Valladolid, Universidad de Complutense de Madrid, Universidad de Castilla La Mancha, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (Madrid), Observatorio Astronómico Nacional del Instituto Geográfico Nacional, Instituto de Astrofísica de Andalucía, Universidad Pablo de Olavide, Universidad de Murcia e Instituto de Astrofísica de Canarias. Número de investigadores participantes: 15
	Manuela María Merchán Bonete	3	2011	
	Alberto Requena Rodríguez	2	2008	
Química Organometálica Computacional	Ramón Sayós Ortega	3	2007	Modelización computacional de la estructura y reactividad de molibdocenos implicados en reacciones orgánicas acuosas benignas con el medio ambiente y procesos bioinorgánicos. Entidad Financiadora: MICINN. Referencia: CTQ2010-18231. Duración: 2011-2013. Tipo de Convocatoria: Proyectos de Investigación Fundamental no Orientada. Instituciones participantes: Universidad de Oviedo. Número de investigadores participantes: 6
	Rafael Rodríguez Pappalardo	2	2005	
	Dimas Suárez Rodríguez	1	2011	
Bioquímica Computacional	Modesto Orozco	5	2011	Advances multiscale simulation of DNA. Entidad Financiadora: ERC Advanced Grants. Referencia: SimDNA. Duración: 2011-2016. Tipo de convocatoria: 7th Framework Programme. Instituciones Participantes: IRB Barcelona. Número de Investigadores Participantes: 23
	Vicent Moliner Ibáñez	4	2009	
	Xabier Lopez Pestaña	2	2010	
Procesos Inducidos por Láseres	Fernando Martín Garcia	3	2008	XUV/X-ray for ultrafast electronic control in chemistry. Entidad/es financiadora/s: EC:ERC (FP7-IDEAS-Advance Grant). Referencia: FP7-IDEAS-2011-AdG:290853. Duración: 01/01/2012 - 31/12/2017. Tipo de convocatoria: Europea (7PM). Instituciones participantes: Universidad autónoma de Madrid. Número de investigadores/as participantes: 22
	Luis Bañares Morcillo	3	2009	
	F. Javier Aoiz Moleres	2	2006	
Sólidos y Superficies	Francesc Illas i Riera	6	2010	Modelización ab initio de materiales de importancia tecnológica basados en óxidos, metales, y las combinaciones de ambos: de la escala nanométrica al sistema extendido. Entidad Financiadora: MEDU-Ministerio de Educación y Ciencia. Referencia: FIS2008-02238/FIS. Duración: Enero 2009 - Diciembre 2013. Tipo de Convocatoria: Plan Nacional, Programa de Investigación Básica no orientada. Instituciones Participantes: UB. Número de Investigadores Participantes: 7
	Javier Fernandez Sanz	2	2009	
	Víctor Luaña Cabal	1	2007	
Estudio de Nuevos Materiales	Juan M. Andrés Bort	3	2010	Moléculas y clusters como bloques de construcción en nanotecnología: autoensamblado y fragmentación. Entidad/es financiadora/s: MICINN (Plan nacional de I+D). Referencia: CTQ2010/17006. Duración: 01/01/2011 - 31/12/2013. Tipo de convocatoria: Nacional. Instituciones participantes: Universidad autónoma de Madrid. Número de investigadores/as participantes: 7
	Manuel Alcamí Pertejo	2	2010	
	Miguel Moreno Mas	1	2006	

PARTICIPACIÓN DE EXPERTOS INTERNACIONALES EN EL PROGRAMA

Además de los equipos descritos anteriormente, se ha previsto la participación de 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 3 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 in Theoretical Chemistry and Computational Modelling con los cuales hay activas colaboraciones.

CONTRIBUCIONES CIENTÍFICAS DEL PERSONAL INVESTIGADOR

TITULO	AUTORES	REVISTA	INDICIOS DE CALIDAD
"Charge-transfer-induced structural rearrangements at both sides of organic/metal interfaces".	Tseng, TC ; Urban, C ; Wang, Y; Otero, R; Tait, SL ; Alcamí, M; Ecija, D; Trelka, M ; Gallego, JM; Lin, N ; Konuma, M; Starke, U; Nefedov, A ; Langner, A; Woll, C; Herranz, MA ; Martin, F ; Martin, N; Kern, K; Miranda, R.	Nature Chemistry (2010) 2, Issue 5, 374-379. DOI: 10.1038/NCHEM.591.	Índice de impacto: 17.927 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 4 Número de revistas en el área: 147
"Crossover site-selectivity in the adsorption of the fullerene derivative PCBM on Au(111)".	Ecija, D; Otero, R; Sanchez, L ; Gallego, JM; Wang, Y; Alcamí, M; Martin, F ; Martin, N; Miranda, R.	Angewandte Chemie-International Edition (2007) Volume 46, Issue 41, 7874-7877. DOI: 10.1002/anie.200702531.	Índice de impacto:12.730 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 147
"Electron localization following attosecond molecular photoionization".	Sansone, G; Kelkensberg, F ; Perez-Torres, JF ; Morales, F ; Kling, MF ; Siu, W ; Ghafur, O ; Johnsson, P; Swoboda, M ; Benedetti, E; Ferrari, F ; Lepine, F ; Sanz-Vicario, JL ; Zharebtsov, S ; Znakovskaya, I ; L'Huillier, A; Ivanov, MY; Nisoli, M; Martin, F ; Vrakking, MJJ.	Nature (2010) Volume 465, Issue 7299, 763-U3. DOI: 10.1038/nature09084.	Índice de impacto: 36.104 Nombre de la categoría: MULTIDISCIPLINARY SCIENCES Posición que ocupa la revista en el área: 1 Número de revistas en el área: 59
"A comparative study of the chemical reactivity of pyridoxamine, Ac-Phe-Lys and Ac-Cys with various glycation carbonyl compounds".	Adrover M.; Vilanova B.; Frau J.; Muñoz, F.; Donoso, J.	Amino Acids (2009) 36, 437-448.	Número de veces citada: 6 (de Web of Science) Índice de impacto: 4.106. Nombre de la categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY Posición que ocupa la revista en el área: 82 Número de revistas en el área: 286
"Tunneling splitting of Jahn-Teller ions in oxides".	P. Garcia-Fernandez, A. Trueba, M.T. Barriuso, , M. Moreno and J.A. Aramburu.	PhysicalReviewLetters (2010) 104 , 035901(1-4).	Número de veces citada: 2 Índice de impacto: 7.62 Nombre de la categoría: Física (Multidisciplinar) Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 80

TITULO	AUTORES	REVISTA	INDICIOS DE CALIDAD
"Temperature Dependence of the Kinetic Isotope Effects in Thymidylate Synthase. A Theoretical Study".	Natalia Kanaan, Silvia Ferrer, Sergio Marti [*] , Mireia Garcia-Viloca, Amnon Kohen, and Vicent Moliner	Journal of the American Chemical Society (2011) 133 (17), 6692–6702.	Índice de impacto: 9.023 Nombre de la categoría: Chemistry, Multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 11 Número de revistas en el área: 147
"Eppursimuoove" (yet it moves).	Moliner, V .	Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America (2011) Volume: 108 Issue: 37 15013-15014 DOI: 10.1073/pnas.1112014108.	Índice de impacto: 9.771 Nombre de la categoría: MULTIDISCIPLINARY SCIENCES Posición que ocupa la revista en el área: 3 Número de revistas en el área: 59
"Unveiling the Chemical and Morphological Features of Sb-SnO(2) Nanocrystals by the Combined Use of High-Resolution Transmission Electron Microscopy and ab Initio Surface Energy Calculations".	Stroppa, DG ; Montoro, LA ; Beltran, A; Conti, TG ; da Silva, RO ; Andres, J; Longo, E; Leite, ER; Ramirez, AJ	Journal of the American Chemical Society (2009) Volume: 131 Issue: 40 14544-14548 DOI: 10.1021/ja905896u.	Índice de impacto: 9.023 Nombre de la categoría: Chemistry, Multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 11 Número de revistas en el área: 147
"Cyclization cascade of allenylazides: a dual mechanism".	Silva Lopez, C.; Nieto Faza, O.; Feldman, K. S.; Iyer, M. R. and Hester, D. K.,	Journal of the American Chemical Society (2007), 129 , 7638-7646	Índice de impacto: 9.023 Nombre de la categoría: Chemistry multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 11 Número de revistas en el área: 147
"Solving the Hydration Structure of the Heaviest Actinide Aqua Ion Known: The Californium(III) Case".	Galbis, E ; Hernandez-Cobos, J; den Auwer, C; Le Naour, C ; Guillaumont, D Simoni, E; Pappalardo, RR; Marcos, ES..	Angewandte Chemie-International Edition (2010). Volume: 49 Issue: 22 3811-3815 DOI: 10.1002/anie.200906129.	Índice de impacto: 12.730 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 147 Número de citas recibidas: 10

TITULO	AUTORES	REVISTA	INDICIOS DE CALIDAD
"Discrete Supramolecular Donor-Acceptor Complexes".	Gayathri, SS ; Wielopolski, M ; Perez, EM; Fernandez, G ; Sanchez, L; Viruela, R; Orti, E; Guldi, DM; Martin, N.	Angewandte Chemie-International Edition (2009) Volume: 48 Issue: 4 Pages: 815-819 DOI: 10.1002/anie.200803984.	Índice de impacto: 12.730 Nombre de la categoría: CHEMISTRY MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 147 Número de citas recibidas: 41
"Simple, Fast, Bright, and Stable Light Source".	Tordera, D ; Meier, S ; Lenes, M ; Costa, RD ; Orti, E ; Sarfert, W ; Bolink, HJ.	Advanced Materials (2012) Volume: 24 Issue: 7 Pages: 897-+ DOI: 10.1002/adma.201104047	Índice de impacto: 10.880 Nombre de la categoría: CHEMISTRY MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 8 Número de revistas en el área: 147
"A Bis-exTTF Macrocyclic Receptor That Associates C(60) with Micromolar Affinity".	Isla, H ; Gallego, M ; Perez, EM; Viruela, R; Orti, E; Martin, N.	Journal of the American Chemical Society (2010) Volume: 132 Issue: 6 Pages: 1772-+ DOI: 10.1021/ja910107m Published: FEB 17 2010	Índice de impacto: 9.023 Nombre de la categoría: CHEMISTRY MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 11 Número de revistas en el área: 147
"Importance of Polarization and Charge Transfer Effects to Model the Infrared Spectra of Peptides in Solution".	Ingrosso, F ; Monard, G ; Farag, MH ; Bastida, A ; Ruiz-Lopez, MF .	Journal Of Chemical Theory And Computation (2011). Volume: 7 Issue: 6 1840-1849 DOI: 10.1021/ct2000588 .	Índice de impacto: 5.138 Nombre de la categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL Posición que ocupa la revista en el área: 1 Número de revistas en el área: 33
"From Bis(N-Alkylimidazole) to Bis(NH-NHC) in Rhenium Carbonyl Complexes".	Huertos, MA ; Perez, J; Riera, L; Diaz, J ; Lopez, R .	Angewandte Chemie-International Edition (2010). Volume: 49 Issue: 36 6409-6412 DOI: 10.1002/anie.201002879	Índice de impacto: 12.730 Nombre de la categoría: CHEMISTRY MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 147

TITULO	AUTORES	REVISTA	INDICIOS DE CALIDAD
“From the X-ray Compact Structure to the Elongated Form of the Full-Length MMP-2 Enzyme in Solution: A Molecular Dynamics Study”.	Diaz, N ; Suarez, D ; Valdes, H.	Journal of the American Chemical Society (2008).Volume: 130 Issue: 43 Pages: 14070-+ DOI: 10.1021/ja806090v .	Índice de impacto: 9.023 Nombre de la categoría: CHEMISTRY MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 11 Número de revistas en el área: 147 Número de citas recibidas: 3
“Sandwich Complexes of the Metalloaromaticeta(3)-Al(3)R(3) Ligand”.	Mercero, JM; Piris, M; Matxain, JM; Lopez, X; Ugalde, JM.	Journal of the American Chemical Society (2009).Volume: 131 Issue: 20 Pages: 6949-+ DOI: 10.1021/ja8095043	Índice de impacto: 9.023 Nombre de la categoría: CHEMISTRY MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 11 Número de revistas en el área: 147 Número de citas recibidas: 7
“Solvent effects on the structure and spectroscopy of the emitting status of 1-phenylpyrrole”	I. Fdez. Galván, M.E. Martín, A. MuñozLosa, M.L. Sánchez, M.A. Aguilar	.Journal of Chemical Theory and Computation, (2011), 7, 1850-1857.	Índice de impacto: 5.138 Nombre de la categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL Posición que ocupa la revista en el área: 2 Número de revistas en el área: 33
“Interference structures in the differential cross-sections for inelastic scattering of NO+Ar”.	J. Eyles, M. Brouard, C.-H. Yang, J. Klos, F. J. Aoiz, A. Gijsbertsen, A. E. Wisekerke, and S. Stolte.	Nature Chemistry (2011) 3 , 597-602.	Índice de impacto: 17.927 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 4 Número de revistas en el área: 147
“Azafullerene-like Nanosized Clusters”.	Lopez, V ; Roman-Perez, G ; Arregui, A ; Mateo-Marti, E; Banares, L ; Martin-Gago, JA; Soler, JM; Gomez-Herrero, J; Zamora, F.	ACS NANO (2009). Volume: 3 Issue: 11 3352-3357 DOI: 10.1021/nn900496e.	Índice de impacto: 9.865 Nombre de la categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 64 Número de citas recibidas: 3

TITULO	AUTORES	REVISTA	INDICIOS DE CALIDAD
“Phase diagram of water under an applied electric field”.	J. L. Aragonés, L. G. MacDowell, I. J. Siepmann and C. Vega.	PhysicalReviewLetters, (2011) 107 , 155702.	Índice de impacto: 7.622 Nombre de la categoría: PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 80
“Support Nanostructure Boosts Oxygen Transfer to Catalytically Active Platinum Nanoparticles”,	G. N. Vayssilov, Y. Lykhach, A. Migani, T. Staudt, G. P. Petrova, N. Tsud, T. Skála, A. Bruix, F. Illas, K. C. Prince, V. Matolín, K. M. Neyman, J. Libuda.	Nature Materials (2011) 10, 310.	Índice de impacto: 29.92 Nombre de la categoría: Physics, Condensed Matter Posición que ocupa la revista en el área: 1 Número de revistas en el área: 68
“Dynamic Nuclear Polarization with Polychlorotriphenylmethyl Radicals: Supramolecular Polarization-Transfer Effects”.	C. Gabellieri, V. Mugnaini, J. C. Paniagua, N. Roques, M. Oliveros, M. Feliz, J. Veciana, M. Pons.	Angew. Chem. Int. Ed. 49(2010), 3360-3362.	Índice de impacto: 12.730 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 147
“Calculation of microscopic exchange interactions and modelling of macroscopic magnetic properties in molecule-based magnets”.	Novoa, J. J.; Deumal, M.; and Jornet-Somoza,	J. Chem. Soc. Rev., 40 (2011), 3182.	Índice de impacto: 26.585 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 2 Número de revistas en el área: 147
“Real time atomistic description of DNA unfolding”.	A. Pérez and M. Orozco.	Angew. Chem. Int. Ed. Eng. 49 (2010), 4805-480.	Índice de impacto: 12.730 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 147

TESIS DOCTORALES

TITULO	NOMBRES	UNIVERSIDAD Y FECHA DE DEFENSA	CALIFICACIÓN	CONTRIBUCIÓN CIENTÍFICA (CC)	INDICIOS DE CALIDAD DE LA CC
Photoionization of the hydrogen molecule using attosecond laser pulses.	Nombre del doctorado: Jhon Fredy Pérez Torres Director/es: Fernando Martín	Universidad Autónoma de Madrid. 18 de Enero 2012.	Sobresaliente cum laude.	"Attosecond Control in Photoionization of Hydrogen Molecules". Kelkensberg, F ; Siu, W ; Perez-Torres, JF ; Morales, F ; Gademann, G ; Rouzee, A ; Johnsson, P; Lucchini, M ; Calegari, F ; Sanz-Vicario, JL ; Martin, F ; Vracking, MJJ. <i>PHYSICAL REVIEW LETTERS</i> (2011) Volume: 107 Issue: 4 Article Number: 043002 DOI: 10.1103/PhysRevLett.107.043002.	Índice de impacto: 7.622 Nombre de la categoría: PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 80 Número de veces citada: 5
Fotodisociación molecular por tomografía de velocidades con imágenes de iones.	Nombre del doctorando: Andrés Arregui Velázquez Director: Luis Bañares y Gabriel Amaral Mathon.	Universidad Complutense de Madrid. 20 de Octubre del 2011.	Sobresaliente cum laude.	"Azafullerene-like Nanosized Clusters.". Lopez, V ; Roman-Perez, G ; Arregui, A ; Mateo-Marti, E ; Banares, L ; Martin-Gago, JA ; Soler, JM; Gomez-Herrero, J; Zamora, F. <i>ACS NANO</i> (2009) 3 , 3352-3357. DOI: 10.1021/nn900496e.	Índice de impacto: 9.865 Nombre de la categoría: Chemistry, multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 10 Número de revistas en el área: 147. Número de veces citada: 3.
Aplicació de la teoria del càlcul de variacions per a la resolució de problemes químics.	Nombre del doctorando: Antoni Aguilar Mogas Director: Josep Maria Bofill Villà y Xavier Giménez Font.	Universidad de Barcelona. 18 de enero de 2011.	Sobresaliente cum laude.	"Implementation of an Algorithm Based on the Runge-Kutta-Fehlberg Technique and the Potential Energy as a Reaction Coordinate to Locate Intrinsic Reaction Paths". Aguilar-Mogas, A. ; Gimenez, X.; Bofill, J.M.J. <i>Comput. Chem.</i> 31 (2010), 2510-2525.	Índice de impacto: 4.050 Nombre de la categoría: Chemistry, Multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 28 Número de revistas en el área: 145. Citas recibidas: 6
Estudio de las propiedades espectroscópicas y la anisotropía magnética de impurezas de metales de transición en aislantes utilizando cálculos a primeros principios: Relación con inestabilidades Jahn-Teller y ferroeléctricas.	Nombre del doctorando: Álvaro Trueba Pérez Directores: Pablo García Fernández y Miguel Moreno Mas	Universidad de Cantabria. 20 de Mayo de 2011	Sobresaliente cum laude.	"Tunneling Splitting of Jahn-Teller Ions in Oxides". Garcia-Fernandez, P; Trueba, A; Barriuso, MT; Aramburu, JA; Moreno, M. <i>PHYSICAL REVIEW LETTERS</i> (2010) Volume: 104 Issue: 3 Article Number: 035901 DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.035901.	Índice de impacto: 7.622 Nombre de la categoría: Physics, multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 80 Número de veces citada: 2

TITULO	NOMBRES	UNIVERSIDAD Y FECHA DE DEFENSA	CALIFICACIÓN	CONTRIBUCIÓN CIENTÍFICA (CC)	INDICIOS DE CALIDAD DE LA CC
Estudio cinético de las reacciones entre piridoxamina y compuestos carbonílicos de interés biológico y biomédico	Nombre del doctorado: Miquel Adrover Estelrich Director/es: Josefa Donoso Pardo y Bartolomé Vilanova Canet.	Universidad de las Islas Baleares. Septiembre 2008	Sobresaliente cum laude.	"A comparative study of the chemical reactivity of pyridoxamine, Ac-Phe-Lys and Ac-Cys with various glycation carbonyl compounds", Adrover M.; Vilanova B.; Frau J.; Muñoz, F.; Donoso, J. AMINO ACIDS (2009) 36 , 437-448.	Número de veces citada: 6 (from Web of Science) Índice de impacto: 4.106 Nombre de la categoría: Biochemistry & Molecular biology Posición que ocupa la revista en el área: 82 Número de revistas en el área: 286
Estudios teóricos sobre reactividad enzimática. Aplicación a la CorismatoMutasa.	Nombre del doctorado: Sergio Martí Forés Director/es: Iñaki Tuñón y Vicent Moliner.	Universitat Jaume I de Castellón. 12 de Abril 2002	Sobresaliente cum laude.	"A hybrid potential reaction path and free energy study of the chorismatase reaction." Adrover N. Kanaan, S. Ferrer, S. Martí, M. García-Viloca, A. Kohen and V. Moliner. J. Am. Chem. Soc. (2001) 123 , 1709-1712.	Índice de impacto: 9.023 Nombre de la categoría: Chemistry, multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 11 Número de revistas en el área: 147 Número de veces citada: 67
Estudio de la Relajación Vibracional de N-Metilacetamida en Disolución Acuosa	Nombre del doctorado: Miguel Angel Soler Bastida Directores: Adolfo Bastida Pascual y Alberto Requena Rodríguez	Universidad de Murcia. 15 de Junio de 2010	Sobresaliente cum laude. Otras Menciones: Doctorado Europeo	"Hybrid quantum/classical simulations of the vibrational relaxation of the amide I mode of N-methylacetamide in d(2)0 solution". Bastida, Adolfo; Soler, Miguel A; Zuniga, Jose; Requena, Alberto; Kalstein, Adrian; Fernandez-Alberti, Sebastian. The journal of physical chemistry. B (2012) Volume: 116 Issue: 9 Pages: 2969-80.	Índice de impacto: 3.603 Nombre de la categoría: Chemistry, Physical Posición que ocupa la revista en el área: 32 Número de revistas en el área: 127
Bonding and Binding in solids. Computational developments and applications.	Nombre del doctorado: Alberto Otero de la Roza. Director: Víctor Luaña Cabal.	Universidad de Oviedo. 9 de Marzo del 2011.	Sobresaliente cum laude.	"A fast and accurate algorithm for QTAIM integration in solids". Otero-de-la-Roza A and Luaña V. Journal of Computational Chemistry (2011) 32 , 291-305.	Índice de impacto: 4.050 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 28 Número de revistas en el área: 147.

TITULO	NOMBRES	UNIVERSIDAD Y FECHA DE DEFENSA	CALIFICACIÓN	CONTRIBUCIÓN CIENTÍFICA (CC)	INDICIOS DE CALIDAD DE LA CC
Theoretical Characterization of Pentavalent Oxyphosphorane Intermediate Structures of the Hydrolysis of RNA Catalyzed by RNase A	Nombre del Doctorando: Elena Formoso Director: Xabier Lopez	Universidad del País Vasco /Euskal Herriko Unibertsitatea. Junio 2010	Sobresaliente cum laude.	"Magnetic Endohedral Transition-Metal-Doped Semiconducting-Nanoclusters". Matxain, JM; Formoso, E; Mercero, JM; Piris, M; Lopez, X; Ugalde, JM. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL (2008) Volume: 14 Issue: 28 Pages: 8547-8554 DOI: 10.1002/chem.200800376. Indicios de calidad:	Índice de impacto: 5.476 Nombre de la categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY Posición que ocupa la revista en el área: 18 Número de revistas en el área: 147. Número de veces citada: 3.
Microsolvatación de cationes en disolución. Desarrollo del modelo de ion hidratado intercambiable y su aplicación a la química de cationes radiactivos	Nombre del doctorado: Elsa Galbis Fuster Director/es: Rafael Rodríguez Pappalardo y Enrique Sánchez Marcos	Universidad de Sevilla. 18 de Diciembre 2010	Sobresaliente cum laude	"Solving the Hydration Structure of the Heaviest Actinide Aqua Ion Known: The Californium(III) Case" E. Galbis, J. Hernández-Cobos, C. Den Auwer, C. Le Naour, D. Gillaumont, E. Simoni, R.R. Pappalardo y E. Sánchez Marcos., Angew. Chem. Intern. Ed.(2010) 49, 3811-3815.	Índice de impacto: 12.730 Nombre de la categoría: Chemistry, multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 5 Número de revistas en el área: 147
Theoretical and Experimental Study of Light-Emitting Electrochemical Cells Based on Ionic Transition-Metal Complexes. From the Molecule to the Device.	Nombre del doctorado: Rubén Darío Costa Riquelme Director/es: Enrique Ortí Guillén y Henk J. Bolink	Universidad de Valencia. 20 de Septiembre 2010	Sobresaliente cum laude.	"A Supramolecularly-Caged Ionic Iridium(III) Complex Yielding Bright and Very Stable Solid-State Light-Emitting Electrochemical Cells", S. Graber, K. Doyle, M. Neuburger, C.E. Housecroft, E.C. Constable, R.D. Costa, E. Ortí, D. Repetto, H.J. Bolink., J. Am. Chem. Soc. (2008) 130, 14944-14945.	Índice de impacto: 9.023 Nombre de la categoría: Chemistry, multidisciplinary Posición que ocupa la revista en el área: 11 Número de revistas en el área: 147 Número de veces citada: 49
Application of QTAIM and other methods of Computational Chemistry to the study of Anthocyanidins and their complexes.	Nombre del doctorado: Laura Estévez Guiance Director/es: Ricardo A. Mosquera Castro	Universidad de Vigo. 22 de Octubre 2009	Sobresaliente cum laude.	"A computational study on the acidity dependence of radical-scavenging mechanisms of anthocyanidins", L. Estévez, N. Otero, R.A. Mosquera., J. Phys. Chem. B, (2010) 114, 9706-9712.	Índice de impacto: 3.610 Nombre de la categoría: Chemistry, Physical Posición que ocupa la revista en el área: 32 Número de revistas en el área: 127

OTROS PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN ACTIVO

Título	Investigadores Principales	Entidad financia/Referencia	Duración	Instituciones Participantes	Nº de investigadores
Materiales Foto y electroactivos para células solares orgánicas e híbridas.	Manuel Yañez Montero y Otilia Mó Romero.	Comunidad de Madrid/CAM S2009PPQ-1533.	01/01/2010-31/12/2013	Universidad autónoma de Madrid	2
Estudios ab initio de estados excitados de materiales con elementos F: de centelleo, luminiscentes y combustibles y residuos nucleares	Zoila Barandiarán Piedra y Luis Ignacio Seijo Loché	Ministerio de Ciencia en Innovación. Secretaría de Estado de Investigación/MAT2011-24586	01/01/2012-31/12/2014	Universidad autónoma de Madrid	3
The role of non-enzymatic glycation on aggregation prone diabetes related polypeptides: a multidisciplinary approach from biophysics to cell toxicity.	Josefa Donoso Pardo	Diabetes UK/12/301111	2012-2014	Universitat de les Illes Balears (UIB) y Grupo de Investigación de la Dra. Annalisa Pastore (applicant). National Institute for Medical Research-MRC. UK	9
Deformaciones estructurales espontáneas en sólidos aislantes y moléculas biológicas.	Miguel Moreno Más, Jose Antonio Aramburu Zabala y María Teresa Barriuso Pérez	Plan Nacional de I+D+i/FIS2009-070831	01/01/2010-31/12/2012	Universidad de Cantabria	6
Desarrollo y aplicación de métodos de simulación mecano-cuánticos en materiales complejos, nanoestructuras y superficies.	Javier Junquera	Ministerio de Ciencia e Innovación/FIS2009-12721-C04	01/01/2010-31/12/2013	Centre de Investigación en Nanociencia y Nanotecnología (CIN2-CSIC), Institut de Ciencia de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC), Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Cantabria, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC)	40
Modelización computacional en catálisis biológica. Aplicaciones en biomedicina y biotecnología	Vicente Moliner Ibáñez y Andrés Bort, Juan M.	MICINN/CTQ2009-14541-C02-01/BQU	01/01/2010-31/12/2012	Universidad Jaume I de Castellón	10
Estudios teóricos de inhibidores de enzimas quinasas: hacia un diseño computacional de fármacos.	Vicente Moliner Ibáñez	Bancaixa-UJI/P1.1B2011-23	01/01/2012-31/12/2014	Universidad Jaume I de Castellón	3
Estructura, estabilidad y propiedades de óxidos metálicos mixtos con estructura ABO₃ y ABO₄ a alta presión	Armando Beltrán Flors Lourdes Gracia Edo	Bancaixa-UJI/P1.1B2009-08	01/01/2010-31/12/2012	Universidad Jaume I de Castellón	2
Theoretical Analysis of Single Molecule Experiments in Enzymes Through Free Energy and Kinetic Isotope Effects Calculations	J. Javier Ruiz Pernía	Subprograma Juan de la Cierva (MICINN-JDC)/JCI-2009-04726.	01/01/2010 - 31/12/2012	Universidad Jaume I de Castellón	1
Estudio computacional de complejos antocianina-copigmento: Estructura molecular y electrónica y actividad antioxidante	Ricardo A. Mosquera Castro, Ana M ^a Graña Rodríguez y Marcos Mandado Alonso	MICINN(Plan Nacional de I+D)/ CTQ2010-21500	1/01/2011-31/12/2013	Universidad de Vigo	3
Espectroscopía Raman amplificada (SERS) sobre superficies de carbono	Ricardo A. Mosquera Castro, Ana M ^a Graña Rodríguez y Marcos Mandado Alonso	Ministerio de Ciencia e Innovación/ CTQ2010-20229	01/01/2011-31/12/2013	Universidad de Vigo	3

Título	Investigador Principal	Entidad financia/Referencia	Duración	Instituciones Participantes	Nº de investigadores
Diseño de circuitos eléctricos unimoleculares	Ricardo A. Mosquera Castro, Ana M ^a Graña Rodríguez y Marcos Mandado Alonso	Consellería de Innovación, Ciencia e Tecnoloxía (Xunta de Galicia)/ 10TMT314014PR	15/12/2010-14/12/2013	Universidad de Vigo	4
Diseño computacional de nuevas rutas sintéticas para la preparación de alcaloides con actividad biológica de kinamicina	Carlos Silva López, Olalla Nieto Faza y Jesús R. Flores Rodríguez	Ministerio de Ciencia e Innovación/ CTQ2009-13703	01/01/2010-31/12/2012	Universidad de Vigo	3
Modelización ab initio de materiales magnéticos polinucleares: evaluación de interacciones locales y simulación de propiedades colectivas	Carmen Jiménez Calzado	Ministerio de Ciencia e Innovación/CTQ2009-07767	01/01/2010-31/12/2012	Universidad de Sevilla	2
Funcionalización superficial de materiales para aplicaciones de alto valor añadido (FUNCOAT). Consolider-Ingenio	Javier Fdez. Sanz	MICINN/CSD2008-00023	01/01/2009 – 31/12/2012	Universidad de Sevilla	9 (US)
Bases de la reactividad y función molecular en fotobiología y nanotecnología: Desarrollos metodológicos químico-cuánticos y aplicaciones (QCBMOL)	Manuela Merchán Bonete, Remedios Gonzalez Luque y Mercedes Rubio Más	MCINN/ CTQ2010-14892	01/01/2011-31/12/2013	Universidad de Valencia	14
Estudios teóricos de catálisis biológica. Metodología y aplicaciones	Ignacio Tuñon y Maite Roca	MCINN/CTQ2009-14541-C02-02	01/01/2010-31/12/2012	Universidad de Valencia	8
Estudio Teórico de Sistemas Electroactivos para Electrónica Molecular	Enrique Ortí Guillén, Pedro M. Viruela Martín y Rafael Viruela Martín	MCINN/CTQ2009-08790	1/01/2010-31/12/2012	Universidad de Valencia	7
Cost-Efficient Lighting Devices Based on Liquid Processes and Ionic Organometallic Complexes (CELLO)	Enrique Ortí Guillén, Pedro M. Viruela Martín y Rafael Viruela Martín	Unión Europea/ FP7-248043	01/01/2010-31/12/2012	Universitat de València (coordinadora), University of Basel (Suiza), Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR, Bologna, Italia), Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (Suiza), OSRAM GMBH (Alemania), SIEMENS AG (Alemania), Valtion Teknillinen Tutkimuskeskus (VTT, Finlandia)	25
Dominios activos mínimos de proteínas de la familia BCL₂	Francisco de Paula Torrens Zaragoza y Jesús Salgado	MICINN/BFU2010-19118	2011-2013	Universidad de Valencia	8
Estudios de reactividad en química orgánica	Luis R. Domingo	MICINN/CTQ2009-11027/BQU	2009-2012	Universidad de Valencia	5

Título	Investigador Principal	Entidad financia/Referencia	Duración	Instituciones Participantes	Nº de investigadores
Determinación de estados vibracionales excitados de moléculas poliatómicas usando superficies de energía potencial polinómicas óptimas	José Zúñiga Román	Fundación Séneca. Centro de Coordinación de la Investigación de la Región de Murcia/08735/PI/08	01/01/2009-31/12/2012	Universidad de Murcia	3
Dinámica de Relajación Vibracional de Péptidos en Disolución	Adolfo Bastida Pascual	Dirección General de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación/CTQ2011-25872	2012 - 2014	Universidad de Murcia	5
Avances en Topología Químico Cuántica	Ángel Martín Pendás, Evelio Francisco Miguélez, Aurora Costales Castro y Víctor Luaña Cabal	MICINN/CTQ2009-08376	2010-2012	Universidad de Oviedo	4
Materia a alta presión	J. Manuel Recio	MICINN/CSD2007-00045 MALTA-Consolider Ingenio-2010	2007-2013	Univ. Jaume I, Univ. Complutense de Madrid, Univ. Autónoma de Barcelona, Univ. La Laguna, Univ. Politécnica de Valencia, INTA-Centro de Astrobiología-CSIC, Univ. de Oviedo, Univ. de Cantabria, Instituto del Frio-CSIC, Univ. Valencia	80
Termodinámica y cinética de transiciones de fase en materiales cristalinos: modelos avanzados y simulaciones computacionales	M. Flórez, J. Manuel Menéndez y Miriam Marqués	MICINN/CTQ2009-15498-C02-02	2009-2012	Universidad de Oviedo	9
Diseño de nanopartículas magnéticas para su aplicación en nano-aparatos	Jesus M. Ugalde	Gobierno Vasco (Departamento Industria, Programa SAIOTEK/S-PC11UN006	2011-2012	Universidad del País Vasco	12
Aplicaciones de la teoría del funcional de orbitales naturales a sistemas biológicos	Jesus M. Ugalde y Xabier Lopez	Gobierno Vasco (Departamento Industria, Programa SAIOTEK)/S-PC11UN003	2011-2012	Universidad del País Vasco	12
Avances en química cuántica	Jesus M. Ugalde y Xabier Lopez	Gobierno Vasco/GIC 07/85 IT-330-07	2007 - 2012	Universidad del País Vasco	12
Avances en química cuántica y algunas aplicaciones a problemas seleccionados de nanociencia y biofísica	Xabier Lopez y Jesus M. Ugalde	MICINN/CTQ2011-2737	2012	Universidad del País Vasco	12

Título	Investigador Principal	Entidad financia/Referencia	Duración	Instituciones Participantes	Nº de investigadores
Estudio de procesos de foto-isomerización en procesos biológicos.	Aurora Muñoz Losa e Ignacio Fernández Galván	Junta de Extremadura/ PRI08A056	3 años	Universidad de Extremadura	7
Quantum chemistry and molecular modelling. Entidad Financiadora:	José Carlos Corchado Martín-Romo y Francisco Javier Olivares del Valle	Junta de extremadura/GR10048	4 años	Universidad de Extremadura	8
Estudio teórico de la fotofísica y fotoquímica de complejos cromóforo-ciclodextrina y cromóforo proteínas PYP y GFP	Manuel Ángel Aguilar Espinosa y M ^a Elena Martín Navarro	MICINN/CTQ2011-25692	1 año	Universidad de Extremadura	7
Dinámica de procesos químicos: Experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos.	F. Javier Aoiz Molerés, Luis Bañares Morcillo, Pedro Gómez Calzada y Jesús Fernández Castillo	MICINN/CTQ2008-02578	2009-2013	UCM (personal de UCM, USAL, EHU/UPV,y CSIC)	17
Control y observación de estados dinámicos coherentes de moléculas con pulsos láser	Ignacio Solá Reija y Jesús Santamaría Antonio	MICINN/CTQ2008-06760	2009-2012	Universidad Complutense de Madrid.	5
Simulaciones clásicas y cuánticas del agua y de su equilibrio de fases	Carlos Vega de las Heras, José Luis Fernández Abascal y Eva González Noya	MICINN/FIS2010-16159	Diciembre 2010- Diciembre 2013	Universidad Complutense de Madrid.	5
Modelización y simulación de sistemas complejos.	Carlos Vega de las Heras, José Luis Fernández Abascal y Eva González Noya	Comunidad de Madrid. Actividades entre grupos de I+D de la Comunidad de Madrid/ P2009/ESP-1691	Enero 2010- Enero 2014	Universidad Complutense de Madrid	5
Modelos físicos para la simulación de tránsitos conformacionales en proteínas.	Antonio Rey Gayo	MICINN/FIS2009-13364-C02-02	2010 - 2012	Universidad Complutense de Madrid	3
Estudio teórico de reacciones de oxidación iniciadas por HO, O₃ y NO₃.	Albert Solé Sabaté	Ministerio de Ciencia e Innovación, Subdirección General de Proyectos de Investigación / CTQ2011-27812	2012 - 2014	Universidad Complutense de Madrid	4
Explorando nuevas estrategias terapéuticas para el tratamiento de enfermedades infecciosas y parasitarias	Francisco Javier Luque Garriga	Ministerio de Economía y Competitividad / SAF2011-27642	Enero 2012- Diciembre 2014	Universidad de Barcelona	7
Diseño asistido por ordenador y síntesis de nuevos inhibidores enzimáticos de naturaleza heterocíclica con potencial actividad antitumoral.	Jaime Rubio Martínez	MICINN/ CTQ2011-29285-C02-02	2012-2014	U. de Barcelona, U. Politécnica de Cataluña y U. de Jaén.	3

Título	Investigador Principal	Entidad financia/Referencia	Duración	Instituciones Participantes	Nº de investigadores
Propiedades magnéticas y transformaciones de fase en cristales con propiedades de interés tecnológico	Juan J. Novoa Vide, Fernando Mota Valeri, Mercè Deumal Solè, Jordi Ribas Ariño y Juan Carlos Paniagua Valle	MICINN/ MAT2011-25972	Enero 2012- Diciembre 2014	Universidad de Barcelona	6
Estructura y Dinámica de Reacciones Químicas, mediante modelos extendidos de Camino de Reacción y la Teoría de la Función de Onda.	Josep Maria Bofill Villà	Ministerio de Economía y Competitividad/ CTQ2011-22505	2012-2014	Universidad de Barcelona	3
Estudio teórico de la dinámica y cinética de reacciones químicas. Química atmosférica, procesos de combustión y aplicaciones a sistemas enzimáticos	Miguel González Pérez	MICINN/CTQ2011-27857-C02-01	Enero 2012- Diciembre 2014	Universidad de Barcelona y Universidad de La Rioja	6
Simulaciones de formas inusuales o tensionadas de los ácidos nucleicos de potencial interés biotecnológico o biomédico.	Modesto Orozco, Guillem Portella, Josep Lluís Gelpi, Agustí Emperador, Federica Batistini, Rosana Colleparado y Pablo Dans	MICINN/BIO2009-10964	2009-2012	IRB Barcelona	17
Scalable Software Services for Life Science	Modesto Orozco, Guillem Portella, Josep Lluís Gelpi, Agustí Emperador, Federica Batistini, Rosana Colleparado y Pablo Dans	European Commission/ ScalaLife	2010-2013	KTH, IRB Barcelona, BSC, BADW, UOXF.E9, SYN.	20
Modelos y simulaciones cinéticas y dinámicas de reacciones en entornos de gases disociados sobre cerámicas de interés en la industria aeroespacial	Ramón Sayós Ortega y Pablo Gamallo Belmonte	MICINN/ CTQ2009-07647	Enero 2010 - Diciembre 2012	Universidad de Barcelona	5
Fisicoquímica de las interacciones de ligandos con polielectrolitos de interés ambiental y fisiológico	Francesc Mas Pujadas, Eudald Vilaseca Font y Sergio Madurga Díez	MICINN/CTM2009-14612-C02-02 (subprograma TECNO)	3 años	Universidad de Barcelona	4
Protein docking and beyond: improving biophysical and computational description of protein-protein and protein-rna interactions	Juan Fernández Recio y Iain Moal	MICINN/BIO2010-22324	Enero 2011- Diciembre 2013	Barcelona Supercomputing Center	8
QM/MM e-pathway: estudio de transferencias electrónicas de largo alcance.	Victor Guallar y María de Fatima Lucas	MICINN/CTQ2010-18123	2011-2013	Barcelona Supercomputing Center	5