I.2.19. Acuerdo 19/CG de 18-12-20 por el que se aprueba la modificación del máster universitario en Química Teórica y Modelización Computacional.

Titulación: Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional Número del título en el RUCT: 4314273

El máster Interuniversitario en Química Teórica y Modelización Computacional es un título en el que participan 14 universidades del territorio nacional (RUCT 4314273): Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Barcelona, Universidad de Cantabria, Universidad de Extremadura, Universidad de las Islas Baleares, Universidad Jaume I Castellón, Universidad de Murcia, Universidad de Oviedo, Universidad de País Vasco, Universidad de Salamanca, Universidad de Santiago de Compostela, Universidad de Valencia, Universidad de Valladolid y la Universidad de Vigo.

A principio del 2019 se presentó una nueva propuesta Erasmus Mundus, previamente se nos había concedido otra que finalizó en julio del 2018, con el siguiente grupo de universidades: Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Barcelona, Universidad de Groninga, Universidad de Lovaina, Universidad Paul Sabatier Toulouse III, Universidad de Perugia, Universidad Sorbona, Universidad de Trieste y Universidad de Valencia. Dicha propuesta fue aprobada y se nos concedió un curso preparatorio para solicitar la verificación del título, verificación que se nos concedió el 10 de marzo de 2020. La primera tanda de estudiantes de este programa ha iniciado estudios en el curso 2020 -2021. Se solicita la modificación del título 4314273 para adaptar su plan de estudios al máster Erasmus Mundus de nueva concesión.

El primer año se imparte a nivel local por país, y en el caso de las universidades españolas que participan la docencia se imparte de manera conjunta entre los dos títulos. Los estudiantes que se matriculan en ambos están en la misma clase por lo que a nivel del estudiante, en cuanto al plan de estudios, no hay diferencia entre los títulos salvo porque en el Erasmus Mundus se establecen unas reglas de movilidad de obligatorio cumplimiento, para los becarios, que no tiene el título 4314273. La modificación que se solicita afecta a una redistribución de las asignaturas principalmente en el segundo año del máster. La siguiente tabla muestra la nueva estructura:

| PRIMER ANO (M1) | | | | | |
|--|-----------|---|----------|--|--|
| Antiguo Plan | ECTS | Nuevo Plan | ECT | | |
| Obligatorias (35 ECTS) | | | | | |
| Obli | | Competencia Científica y | | | |
| Lengua Europea | 5.0 | Lingüística Transversal | 5.0 | | |
| Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica | 5.0 | Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica | 5.0 | | |
| Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación | 5.0 | Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación | 5.0 | | |
| Técnicas Computacionales y Cálculo | 5.0 | Técnicas Computacionales y | 5.0 | | |
| Numérico | | Cálculo Numérico | | | |
| Métodos de la Química Teórica I | 5.0 | Métodos de la Química Teórica I | 5.0 | | |
| Métodos de la Química Teórica II | 5.0 | Métodos de la Química Teórica II | 5.0 | | |
| Simetría en átomos, moléculas y sólidos | 5.0 | Simetría en átomos, moléculas y sólidos | 5.0 | | |
| Optati | vas (25 E | CTS) | l | | |
| Sólidos | 5.0 | Sólidos | 5.0 | | |
| Linux y Linux de gestión | 5.0 | Linux y Linux de gestión | 5.0 | | |
| Laboratorio de Química Teórica Aplicada | 5.0 | Laboratorio de Química Teórica Aplicada | 5.0 | | |
| Láseres | 5.0 | Láseres | 5.0 | | |
| Bioquímica Computacional | 5.0 | Bioquímica Computacional | 5.0 | | |
| Profundización en los métodos de la Química Teórica | 5.0 | Profundización en los métodos de la Química Teórica | 5.0 | | |
| Estados Excitados | 5.0 | Estados Excitados | 5.0 | | |
| Dinámica de las Reacciones Químicas | 5.0 | Dinámica de las Reacciones Químicas | 5.0 | | |
| SEGUNDO AÑO (M2) | | | | | |
| Antiguo Plan | ECT S | Nuevo Plan | ECT S | | |
| Teoría Avanzada de la Estructura Electrónica y la Materia Condensada (obligatoria) | 9.0 | Métodos Avanzados en Estructura Electrónica, Dinámica y Modelización Molecular (obligatoria)* | 12.0 | | |
| Dinámica Química y Molecular y Simulación y Modelización por Ordenador (obligatoria) | 9.0 | | | | |
| *Los 6 ECTS que faltan, correspondientes a la parte de simulación y materia condensada, pasan a ser optativos. | | | | | |
| Trabajo Fin de Máster | 30.0 | Trabajo Fin de Máster | 30.0 | | |
| | | Optativas (18 ECTS) | | | |
| Técnicas Computacionales Avanzadas (obligatoria) | 6.0 | Técnicas Computacionales Avanzadas (optativa) | 6.0 | | |

| Aplicaciones (obligatoria) | | Multiescala, Machine Learning y métodos QSAR aplicados a biomoléculas (optativa) | 6.0 |
|----------------------------|-----|--|-----|
| | | Métodos teóricos para la simulación de materiales (optativa) | 6.0 |
| | | Proyecto de programación de química computacional (optativa) | 6.0 |
| | 6.0 | De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica (optativa) | 6.0 |
| | | Modelización de estructura electrónica | 6.0 |
| | | Modelización multiescala de sistemas moleculares complejos | 6.0 |
| | | Química de superficies e interfases: experimentación y modelización | 6.0 |

Tal y como aparece reflejado en la tabla los cambios que se proponen afectan básicamente al segundo año. En el primer año se propone el cambio de asignatura de Lengua Europea a Competencia Científica y Lingüística Transversal. Esta adaptación se enmarca dentro del objetivo de que el estudiante adquiera las herramientas necesarias para desarrollar con mayor eficacia su carrera científica. El contenido de la asignatura pasaría a ser (temario impartido en inglés/español):

- Comunicación y difusión de la ciencia.
- Escritura científica: los pasos para escribir un artículo.
- Cómo utilizar las bases de datos de publicaciones científicas.
- La financiación en la ciencia: cómo funciona el marco nacional y europeo.
- Gestión de proyectos.

El segundo año del máster pasaría a tener 42ECTS obligatorios y 18ECTS optativos. Esta reorganización del plan de estudios presenta la mejora de las asignaturas optativas, que anteriormente no estaban, y cuyo contenido venía siendo desarrollado en la asignatura Aplicaciones. Cada año ésta se adaptaba a alguno de los temas que se ofrecen ahora como optativas, lo que imposibilitaba al estudiante de un curso estudiar lo que se había impartido en el anterior. Además, se introduce dentro del currículo, como optativa, la asignatura "De la teoría a la implementación: tutoriales en química teórica" que desarrolla la Universidad Paul Sabatier y que tiene éxito entre los estudiantes. En el antiguo plan, si bien esta asignatura no contaba con ECTS, los estudiantes la seguían como formación complementaria.

La reducción de ECTS de la asignatura "Métodos Avanzados en Estructura Electrónica, Dinámica y Modelización Molecular (obligatoria)" permitirá que su impartición se desarrolle en dos semanas intensivas en lugar de las antiguas 3 semanas.

Cabe destacar que este plan ya ha sido aprobado para el Erasmus Mundus, se adjunta carta de aprobación de verificación, por lo que se pide se apruebe la solicitud de modificación para que los dos títulos sigan el mismo plan de estudios.