

## **Solicitud de Verificación de Programa de Doctorado**

1. DENOMINACIÓN: Química Teórica y Modelización Computacional

## **2. UNIVERSIDAD: Autónoma de Madrid (Coordinadora)**

Este programa incluye como periodo de formación el **Máster Interuniversitario en Química Teórica y Modelización Computacional / Theoretical Chemistry and Computational Modelling** (MO2006-00459) que ha sido sometido a verificación en fecha 31/12/2008

Doctorado con **Mención de calidad** (referencia MCD2003-00675) vigente hasta el curso 2009/10

### **Universidades participantes:**

Universidad Autónoma de Madrid (coordinadora)  
Universidad de Cantabria  
Universidad Complutense Madrid  
Universidad de Extremadura  
Universidad de Granada  
Universidad de las Islas Baleares  
Universidad Jaume I de Castellón  
Universidad de Murcia  
Universidad de Oviedo  
Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea  
Universidad de Sevilla  
Universitat de València  
Universidad de Vigo

### 3. COMPETENCIAS

Al completar los estudios correspondientes al periodo de formación y al periodo de investigación, los estudiantes:

- Habrán demostrado una comprensión sistemática de la metodología utilizada en Química Teórica y el dominio de las habilidades y métodos de investigación relacionados con la simulación en Química.
- Habrán realizado una contribución a través de una investigación original que amplíe las fronteras del conocimiento en simulación en Química, desarrollando un corpus sustancial, que merezca, al menos en parte, la publicación referenciada a nivel nacional o internacional
- Serán capaces de realizar un análisis crítico de las metodologías utilizadas y de los resultados obtenidos así como la evaluación y síntesis de ideas nuevas y complejas.
- Serán capaces de concebir, diseñar, poner en práctica y adoptar un proceso sustancial de investigación con seriedad académica y rigor científico.
- Sabrán comunicarse con sus colegas que trabajan en el campo de la Química, o en otras áreas afines, tanto a nivel experimental como teórico, con la comunidad académica en su conjunto y con la sociedad en general, acerca de las predicciones realizadas o de la racionalización de la evidencia experimental utilizando métodos de la Química Teórica.
- Serán capaces 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.
- Tendrán una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica en Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis. El carácter interuniversitario del programa de doctorado les permitirá conocer diversos grupos que trabajan en estas áreas en España.

El programa de doctorado pretende preparar expertos en el uso y desarrollo de técnicas computacionales con aplicaciones a muy diversos campos que van desde la reactividad química, la espectroscopia o la catálisis, hasta la bioinformática, pasando por la ciencia de materiales o los polímeros. El carácter fuertemente interdisciplinar del doctorado permite cubrir las áreas fundamentales de la Química: orgánica, inorgánica, química del estado sólido, espectroscopía, cinética, catálisis, polímeros, espectrometría de masas, diseño molecular, así como áreas fundamentales de la Física: física atómica y molecular, física de la materia condensada y materiales, y varias áreas de la bioquímica, bioinformática, química biológica y química médica.

## **4. VÍAS DE ACCESO**

### **4.1. Acceso al periodo de formación**

Para acceder al periodo de formación será necesario estar en posesión de un título universitario oficial español u otro expedido por una institución de educación superior del Espacio Europeo de Educación Superior que facultan en el país expedidor para el acceso a enseñanzas de máster.

Asimismo, podrán acceder los titulados universitarios conforme a sistemas educativos ajenos al Espacio Europeo de Educación Superior sin necesidad de la homologación de sus títulos, previa comprobación de que aquellos acreditan un nivel de formación equivalente a los correspondientes títulos universitarios oficiales españoles y que facultan, en el país expedidor del título, para el acceso a enseñanzas de postgrado. El acceso por esta vía no implicará, en ningún caso, la homologación del título previo de que esté en posesión el interesado, ni su reconocimiento a otros efectos que el de cursar estas enseñanzas.

### **4.2. Acceso al periodo de investigación**

Para acceder al Programa de Doctorado en su periodo de investigación será necesario estar en posesión un título oficial de Máster Universitario, u otro del mismo nivel expedido por una institución de educación superior del Espacio Europeo de Educación Superior.

Además, podrán acceder los que estén en posesión de un título obtenido conforme a sistemas educativos ajenos al Espacio Europeo de Educación Superior, sin necesidad de su homologación, pero previa comprobación de que el título acredita un nivel de formación equivalente a los correspondientes títulos españoles de Máster Universitario y que faculta en el país expedidor del título para el acceso a estudios de Doctorado. El acceso por esta vía no implicará, en ningún caso, la homologación del título previo del que esté en posesión el interesado, ni su reconocimiento a otros efectos que el de cursar enseñanzas de Doctorado.

Asimismo, podrán acceder al periodo de investigación quienes cumplan alguna de las siguientes condiciones:

- a) Haber superado 60 créditos incluidos en uno o varios Másteres Universitarios.
- b) Estar en posesión del Diploma de Estudios Avanzados, obtenido de acuerdo con lo dispuesto en el Real Decreto 778/1998, de 30 de abril, o quienes hubieran alcanzado la suficiencia investigadora regulada en el Real Decreto 185/1985, de 23 de enero.
- c) Estar en posesión de un título de Graduado o Graduada cuya duración, conforme a normas de derecho comunitario sea de, al menos, 300 créditos.

## **5. CRITERIOS DE ADMISIÓN**

### **5.1. Admisión al periodo de formación**

Los estudiantes que cumplan con los requisitos detallados en 4.1, serán admitidos en el Programa de Doctorado en su periodo de formación conforme a los siguientes requisitos de admisión específicos y criterios de valoración de méritos:

- Requisitos de admisión específicos: haber cursado estudios previos de grado en Química, Física, Ciencias de Materiales o áreas de conocimiento afines,

-Criterios de valoración de méritos: Son los aprobados en el master internacional en Química Teórica y Modelización Computacional y que se transcriben a continuación:

*La selección de los estudiantes la llevará a cabo un Comité Internacional sobre las bases siguientes:*

- *El CV*
- *Una carta de motivación*
- *El nombre de dos personas que puedan ser contactadas como referencia.*

*Exactamente los mismos criterios se aplicarán a los estudiantes europeos que a los estudiantes de terceros países.*

*El Comité Internacional al que se alude está presidido actualmente por Manuel Yáñez (Universidad Autónoma de Madrid) y tiene la composición siguiente:*

- 1. Por Bélgica, Prof. A. Ceulemans, Univ. de Leuven*
- 2. Por España: Prof. M. Yáñez, Univ. Autónoma de Madrid y Prof. I. Nebot, Univ. de Valencia*
- 3. Por Francia, Prof. C. Minot, Univ. Paris VI y Prof. C. Marsden, Univ. de Toulouse*
- 4. Por Holanda, Prof. R. Broer, Univ. de Groningen*
- 5. Por Italia: Prof. A. Lagana, Univ. de Perugia y Prof. M. Persico, Univ. de Pisa*
- 6. Por Portugal, Prof. Maria Joao Ramos, Univ. de Porto*

Los miembros del comité de cada país se renuevan a propuesta de los miembros salientes o del presidente de turno del comité siendo preceptiva la aprobación del comité internacional.

### **5.2. Admisión al periodo de investigación**

Los estudiantes que cumplan con los requisitos detallados en 4.2, serán admitidos al periodo de investigación conforme a los requisitos de admisión específicos y criterios de valoración de méritos siguientes:

- El CV del candidato
- Las calificaciones obtenidas por el candidato en el periodo de formación
- Una carta de motivación donde se explique el trabajo de investigación a realizar
- El historial del grupo donde realizará el periodo de investigación.

## 6. ORGANIZACIÓN DEL PROGRAMA

### 6.1. Organización del periodo de formación

El periodo de formación se estructura en torno al Máster en Química Teórica y Modelización Computacional / Theoretical Chemistry and Computational Modelling (MO2006-00459) que ha sido sometido a verificación en fecha 31/12/2008.

A continuación se ofrece una tabla resumen de las materias impartidas en el master asociado al programa de doctorado y que constituye el periodo de formación.

El trabajo de fin de master se realiza en una institución distinta a la de origen del estudiante, lo que obliga a una movilidad durante el segundo año de al menos 3 meses.

<b>TIPO DE MATERIA</b>	<b>1º año</b>	<b>2º año</b>
	<b>CRÉDITOS</b>	<b>CRÉDITOS</b>
<b>Cursos de Nivelación</b>	10	
<b>Lengua extranjera</b>	5	
<b>Obligatorias</b>	30	30
<b>Optativas</b>	15	
<b>Trabajo fin de Máster</b>		30
<b>CRÉDITOS TOTALES</b>	<b>60</b>	<b>60</b>

### 6.2. Organización del periodo de investigación

El Programa de Doctorado no plantea ningún requerimiento docente adicional en el periodo de investigación, salvo en aquellos casos de alumnos provenientes de masters distintos al de Química Teórica y Modelización Computacional / Theoretical Chemistry and Computational Modelling y para los que se considere que deben cursar determinadas asignaturas de dicho master como complemento a su formación. El número de créditos a cursar en estos casos nunca podrá superar los 60 créditos.

Durante el periodo de investigación el estudiante se centrará en realizar el trabajo de investigación que constituirá su tesis doctoral y se fomentará su participación en las siguientes actividades formativas relacionadas con su trabajo de investigación:

- Impartición de seminarios sobre el progreso del trabajo de investigación.
- Asistencia a congresos y presentación de ponencias en los mismos.
- Asistencia a seminarios de investigación.
- Asistencia a cursos de verano, cursos intensivos o workshops nacionales e internacionales-

Hay que destacar que existe una fuerte interrelación entre los grupos de investigación de las universidades implicadas en doctorado, por lo que es frecuente que existan proyectos de colaboración entre distintos grupos e intercambio de estudiantes. Se fomentará, tal y como se ha venido haciendo en los últimos 10 años, la movilidad de estudiantes entre los laboratorios para aprender técnicas y métodos complementarios a las que se desarrollan en el grupo de origen del estudiante.

A continuación, y clasificadas por Universidades, se dan las líneas de investigación que se ofertan para la formación investigadora y para el desarrollo de tesis doctorales. Las tesis doctorales estarán dirigidas por personal docente e investigador que tenga título que le habilite para ello y tenga acreditado al menos un sexenio de investigación, salvo cuando la situación contractual del director no le haya permitido presentarse a la solicitud de sexenios, en cuyo caso deberá acreditar un curriculum investigador equivalente. Los doctores que no cumplan este requisito solo podrán co-dirigir con directores que si lo cumplan.

#### **Universidad Autónoma de Madrid**

- Reacciones ión-molécula en fase gas. Enlace, perturbaciones de enlace y reactividad
- Modelización de sistemas fotovoltaicos
- Caos cuántico y clásico en dinámica molecular
- Dinámica de fragmentación de clusters y moléculas
- Ionización y disociación de moléculas por pulsos láser ultracortos

#### **Universidad de Cantabria**

- Inestabilidades Jahn-Teller y pseudo Jahn-Teller de impurezas de metales de transición en materiales aislantes: origen de los desplazamientos "on-center" y "off-center".
- Inestabilidades en materiales puros
- Origen del color en minerales con impurezas de metales de transición
- Estudios computacionales de materiales dieléctricos, ferroeléctricos y piezoeléctricos
- Simulaciones de interfases

#### **Universidad de Extremadura**

- Evolución de estados excitados en disolución. Búsqueda y caracterización de intersecciones cónicas
- Efectos de disolvente en la cinética y termodinámica de reacciones químicas.
- Efectos de disolvente en el espectro de moléculas de interés biológico,

#### **Universidad de Granada**

- Mecanismos de las reacciones orgánicas
- Organocatálisis
- Modelado molecular de estructuras complejas de nanotubos de carbono
- Desarrollo del software CONTUB para la conexión de nanotubos.

#### **Universidad de las Islas Baleares**

- Reactividad química y enzimática de los análogos de la vitamina B6. Modelado molecular de enzimas que dependen del PLP y del PMP.
- Estudio de la inhibición de la formación de ALE (Advanced Lipoxidation End-products) y AGE (Advanced Glycation End-products).

#### **Universidad Jaume I de Castellón**

- Estudios teóricos de reactividad química en medios condensados; disolución y proteínas.
- Desarrollos metodológicos de algoritmos híbridos QM/MM.
- Diseño de inhibidores enzimáticos y nuevos catalizadores biológicos.
- Estudio de la estructura cristalina, estabilidad y propiedades de óxidos metálicos mixtos con estructuras ABO<sub>3</sub> y ABO<sub>4</sub> a alta presión.
- Estudios teóricos de nanoestructuras
- Estudio teórico de electrones, excitones y multiexcitones en nanocristales semiconductores

#### **Universidad de Murcia**

- Dinámica de estados excitados de moléculas en disolución
- Estudio teórico de espectro vibracional de moléculas poliatómicas
- Láseres y procesos fotoquímicos

### **Universidad de Oviedo**

- Interacciones intermoleculares
- Cinética química teórica
- Química organometálica teórica
- Simulación de metaloproteasas de matriz
- Teoría del enlace químico en el espacio real
- Simulación de cambios de fase inducidos por presión

### **Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea**

- Incorporación de metales de transición en nuevos compuestos tipo-sandwich
- Sólidos porosos moleculares basados en clusters endo-dopados
- Bases moleculares de la toxicología del Aluminio(III)
- Simulación computacional de sistemas biológicos
- Densidades electrónicas de par y densidades electrónicas
- Desarrollos en Teoría del Funcional de Orbitales Naturales
- Efectos de apantallamiento tipo Yukawa en sistemas moleculares
- Estructura electrónica en puntos cuánticos

### **Universidad de Sevilla**

- Estudios teóricos de sólidos, superficies y catálisis
- Estructura molecular y reactividad
- Estudios teóricos de la solvatación de metales

### **Universitat de València**

- Química cuántica de estados excitados en biomoléculas
- Simulación por ordenador de procesos químicos en disolución y medios enzimáticos
- Estudio teórico de propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de sistemas policonjugados usados en electrónica molecular
- Desarrollo e implementación de métodos químico cuánticos ab-initio para sistemas grandes.
- Determinación teórica de propiedades moleculares en nano-sistemas y moléculas de interés astrofísico o atmosférico
- Modelado molecular, diseño y desarrollo de fármacos asistido por ordenador.
- Catálisis heterogénea: Reactividad química sobre catalizadores sólidos (zeolitas , clusters metálicos....)

### **Universidad de Vigo**

- Análisis avanzado de la estructura electrónica
- Estudio teórico de interacciones moleculares
- Estudio teórico de reacciones químicas de interés astrofísico y atmosférico.
- Química Cuántica de alta exactitud.