

DENOMINACIÓN

**I121-02 Programa Oficial de Postgrado en Química Teórica y Computacional
Doctor por la Universitat de València**

OBJETIVOS Y ORGANIZACIÓN DEL DOCTORADO

OBJETIVOS

El Doctorado en el Programa de Postgrado en Química Teórica y Computacional tiene como objetivo la formación de investigadores en el área, tanto en el desarrollo de metodología como en la elaboración de herramientas de cálculo como en la aplicación de los métodos cuánticos a la resolución de problemas en:

- Aspectos destacados en Nanociencia y Nanotecnología
- Modelización de sistemas biológicos
- Materiales por diseño
- Reactividad y Catálisis
- Estados Excitados: Espectroscopía, Dinámica y Reactividad
- Atmósfera y Espacio

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

- Química Cuántica del Estado Excitado: Fotobiología teórica
- Química cuántica de materiales moleculares
- Reactividad química: química atmosférica
- Reactividad química: catálisis heterogénea
- Reactividad química: Efectos del medio
- Reactividad química: Mecanismos de reacciones orgánicas
- Métodos químico-cuánticos de alta precisión
- Simulación y modelado molecular
- Ingeniería de Péptidos y Proteínas

ACTIVIDADES COMPLEMENTARIAS:

- 1) Asistencia a cursos de metodología de la investigación en el área disciplinar correspondiente.
- 2) Asistencia a Seminarios, jornadas y conferencias organizadas por el ICMol.
- 3) Presentación de ponencias a congresos científicos.
- 4) Exposición pública de avance de resultados de la Tesis Doctoral en seminarios del Instituto.

CRITERIOS DE ADMISIÓN Y SELECCIÓN DE DOCTORANDOS

Admisión:

-El requisito específico para ser admitido en el Doctorado es tener el título de Master en Theoretical Chemistry and Computational Modelling. Adicionalmente, se podrán admitir estudiantes que tengan un título de Master afín, obtenido en una Universidad española o extranjera.

-La Comisión responsable del Programa podrá establecer en el momento de la admisión, y para aquellos estudiantes que tengan un título de Master afín al de Theoretical Chemistry and Computational Modelling, la obligatoriedad de cursar algunos módulos, dependiendo de la formación específica de cada estudiante.

-La admisión de un estudiante estará condicionada a la disponibilidad de Doctores para tutelar al estudiante, teniendo en cuenta las líneas de investigación en la que éste haya mostrado interés.

Criterios de selección: Se establecerá una valoración del expediente académico, del *curriculum vitae* y de la motivación del candidato.

Para ello los estudiantes tendrán que aportar la documentación acreditativa, incluyendo una carta personal en la que el candidato exprese su motivación para realizar el doctorado en este programa de postgrado y dos cartas de presentación de dos profesores de Universidad o Investigadores.

La comisión de selección podrá acordar una entrevista personal con los posibles doctorandos si lo considera oportuno.

RELACIÓN DE PROFESORES E INVESTIGADORES DE LAS TESIS DOCTORALES

Dirección de Tesis Doctorales

- Sánchez Marín, José
- Nebot Gil, Ignacio José
- Ortí Guillén, Enrique
- Sánchez de Meras, Alfredo
- Torrens Zaragoza, Francisco
- Viruela Martín, Pedro Manuel
- Viruela Martín, Rafael
- González Luque, M. Remedios
- Merchán Bonete, Manuela
- Pou Amérigo, Rosendo
- Serrano Andrés, Luis
- Silla Santos, Estanislao
- Tuñón García de Vicuña, Iñaki
- Pascual-Ahuir Giner, Juan Luis
- Domingo Asensi, Luis
- Salgado Benito, Jesús

Co-dirección de Tesis Doctorales

Podrán co-dirigir Tesis Doctorales junto con alguno de los relacionados anteriormente:

- Rubio Mas, Mercedes
- García Cuesta, Inmaculada
- Pitarch Ruíz, José Vicente