



## DOCTORADO EN QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL

### Información general

<b>Organización:</b>	Instituto Universitario de Ciencia Molecular (ICMOL)
<b>Universidades participantes:</b>	Universitat de València 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 Universidad de Vigo
<b>Contacto para información de carácter administrativo:</b>	<a href="mailto:doctorado@uv.es">doctorado@uv.es</a>
<b>Contacto para información de carácter académico:</b>	José Sánchez Marín ( <a href="mailto:jose.sanchez@uv.es">jose.sanchez@uv.es</a> )
<b>Periodo de formación del Programa de Doctorado:</b>	Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
<b>Más información sobre el periodo de formación :</b>	<a href="http://www.uv.es/pop/ofertamasterssp.htm">http://www.uv.es/pop/ofertamasterssp.htm</a>
<b>Proviene de un Programa de Doctorado con Mención de calidad</b>	<input checked="" type="checkbox"/> Sí <input type="checkbox"/> No

### Descripción

Se trata de un doctorado interuniversitario, cuya coordinación corresponde a la Universidad Autónoma de Madrid.

### Objetivos

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 de la misma área o de 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 marcadamente 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.

## Requisitos Específicos de Admisión

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.

La admisión a los estudios de doctorado supondrá la aceptación del proyecto de tesis doctoral, su adscripción a una de las líneas de investigación previstas en el programa y la asignación de un director de tesis doctoral.

Los trámites relativos a la realización, presentación y lectura de la tesis doctoral se regirán por la Normativa de Estudios de Doctorado de la Universidad de Valencia.

Requisitos específicos de admisión al periodo de formación: estudios previos de grado en Química, Física, Ciencias de Materiales o áreas de conocimiento afines.

Criterios de valoración de méritos: rigen los aprobados en el máster internacional en "Química Teórica y Modelización Computacional". La selección de los estudiantes la llevará a cabo un Comité Internacional que valorará: a) CV; b) Una carta de motivación; c) Datos y nombres de dos personas que puedan ser contactadas como referencia.

Los requisitos de admisión al periodo de investigación del Programa de Doctorado serán los siguientes: a) CV; b) Las calificaciones obtenidas por el candidato en el periodo de formación; c) Una carta de motivación donde se detalle el futuro trabajo de investigación; d) El historial del grupo donde realizará el periodo de



investigación.

## Criterios de selección (en el caso de que la demanda supere la oferta)

En caso que la demanda supere a la oferta, registrarán criterios los requisitos de admisión citados anteriormente y por orden de prioridad.

## Estructura del programa (código 3058)

El periodo de formación se estructura en torno al máster en "Química Teórica y Modelización Computacional / Theoretical Chemistry and Computational Modelling" (MO2006-00459), también interuniversitario, que ha sido verificado en fecha 31/8/2009. Este máster ha sido reconocido como EMMC (Erasmus Mundus Master Course) para el periodo 2010-2015, a partir del curso 2010-2011.

El Programa de Doctorado solo tiene requerimientos docentes adicionales en casos de alumnos provenientes de másteres distintos al de "Química Teórica y Modelización Computacional / Theoretical Chemistry and Computational Modelling" y para aquellos que se considere que deben cursar determinadas asignaturas de dicho máster, como complemento a su formación. El número de créditos requeridos, en estos casos, nunca podrá superar los 60.

Durante el **periodo de investigación**, el estudiante se centrará en realizar el trabajo de investigación que constituirá su tesis doctoral; se fomentará su participación en actividades formativas relacionadas con esta tarea (seminarios, asistencia a congresos, asistencia a cursos o "workshops", etc.). Dada la fuerte interrelación entre los grupos de investigación de las universidades implicadas en este doctorado, es frecuente que existan proyectos de colaboración entre distintos grupos e intercambio de estudiantes. Se incentivará, 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.

## Líneas de investigación

[http://www.uv.es/pop/docs\\_D/linies\\_investigaciosp.pdf](http://www.uv.es/pop/docs_D/linies_investigaciosp.pdf)

## Directores/as de tesis doctorales

[http://www.uv.es/pop/docs\\_D/directors\\_tesisssp.pdf](http://www.uv.es/pop/docs_D/directors_tesisssp.pdf)