

Informe autoevaluación: 5600888 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling

DATOS DEL TÍTULO

Número de Expediente (RUCT):	5600888
Denominación Título:	Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling
Fecha de verificación inicial:	27-02-2014
Fecha de última modificación aprobada de la memoria:	-
Universidad responsable:	Universidad Autónoma de Madrid
Universidades participantes:	Universidad Autónoma de Madrid, Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Barcelona, Universidad de Cantabria, Universidad de Extremadura, Universidad de Murcia, Universidad de Oviedo, Universidad de Sevilla, Universidad de Vigo, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea
Centro en el que se imparte:	Escuela de Doctorado Multidisciplinar, Facultad de Ciencias Químicas
Idioma:	Español
Modalidad:	

INTRODUCCIÓN.- La redacción de este apartado se realizará conforme a las indicaciones señaladas en la Guía de evaluación para la renovación de la acreditación: :

El programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional/Theoretical Chemistry and Computational Modelling, conocido internacionalmente por sus siglas en inglés TCCM, se aprobó el 27 de Febrero de 2014 (código RUCT 5600888) como programa interuniversitario entre 13 universidades públicas españolas: la Universidad Autónoma de Madrid como universidad coordinadora; la Universidad Complutense de Madrid; la Universidad de Barcelona; la Universidad de Cantabria; la Universidad de Extremadura; la Universidad de las Illes Balears; la Universidad de Murcia; la Universidad de Oviedo; la Universidad de Sevilla; la Universidad de Vigo; la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea; la Universidad Jaume I de Castellón y la Universidad de Valencia (Estudi General)

La información básica del título se puede encontrar en el siguiente enlace de la Escuela de Doctorado de la universidad coordinadora:

(<https://www.uam.es/EscuelaDoctorado/documento/1446743663510/Qu%C3%ADmica%20Teórica.pdf>)

El programa de doctorado se ha implementado conforme a la memoria de verificación aprobada por la ANECA en la fecha indicada y cuyo contenido completo se puede consultar en los enlaces incluidos en el enlace anterior o directamente en:

<https://www.uam.es/EscuelaDoctorado/documento/1446773630557/Memoria.pdf>

Contexto y necesidad del programa:

La Química Teórica representa un área de investigación que en España ha tenido siempre un muy alto nivel de calidad con grupos de investigación muy fuertes distribuidos por todo el país. Una realidad compartida, dado el alto nivel necesario en física y matemática para trabajar en esta especialidad, es que el número de estudiantes que se capta en cada universidad es bastante bajo, en especial en universidades pequeñas, donde sólo hay uno o dos grupos trabajando en esta área. Además, la Química Teórica se aplica a ámbitos muy distintos, desde la modelización de reacciones químicas, a la química de superficies, el diseño de fármacos o la nanociencia. Esta necesidad compartida de tener una formación en común, donde los estudiantes pudieran crear una amplia red de contactos y recibir formación en metodologías y ámbitos de aplicación muy distintos, hizo que desde hace más de 20 años se haya creado una red de formación a nivel nacional entre los grupos que trabajan en Química Teórica y Modelización en España.

Desde que se empezaron a fomentar en España programas de posgrado interuniversitario se creó una red en el campo de la Química Teórica y se presentaron diversos programas de formación conjunta interuniversitaria. Ya en 1998 se crea el programa de doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional que comenzó su andadura en el curso 1999-2000 con la participación de 12 universidades españolas y en el que se organizó el primer curso de formación conjunta para todos los estudiantes participantes en el programa y que se ha mantenido desde entonces (desde 2007 dentro de un programa asociado de máster). Posteriormente el programa se fue adaptando a los cambios a las distintas legislaciones del doctorado (RD 56/2005; RD 1393/2007 y finalmente RD 99/2011), pero manteniéndose siempre como programa de doctorado interuniversitario. A partir del 2007 y siguiendo la normativa del RD 1393/2007 se crea también el máster en Química Teórica y Modelización Computacional/ Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM) -RUCT 4314273-. Ambos programas de máster y doctorado mantienen fuertes interrelaciones entre ellos, con un núcleo amplio de universidades que participan en ambos, y siendo los estudios del máster TCCM, la vía habitual, pero no exclusiva, de entrada de estudiantes al programa de doctorado. (Nota: en la memoria de verificación se menciona también el Master en Química Teórica y Computacional -RUCT 4311428- que se impartía entre las universidades de Girona, Rovira i Virgili, Barcelona y Autónoma de Barcelona y que se extinguió en 2014, la Universidad de Barcelona se incorporó posteriormente al máster TCCM. En el resto de este informe no se menciona dicho máster al estar ya extinguido durante el periodo de evaluación)

En cuanto a la calidad del programa hay que indicar que desde 2003, cuando se crea la mención de calidad, el programa de doctorado la obtuvo y mantuvo siempre esa mención renovándola en 2011 dentro del programa de mención hacia la excelencia. Hay que destacar la dimensión internacional del programa de posgrado en TCCM: ya en 2003 fue seleccionado como programa piloto de la Comunidad de Madrid para explorar la creación de un posgrado Europeo en el área, que dio lugar a un master Europeo TCCM. Esta iniciativa ha recibido en los periodos 2009-2018 y 2019-2025 y coordinado por la UAM el reconocimiento como Máster Erasmus Mundus, con una financiación global de 8.4 millones de euros. Además, el grueso de ese consorcio Europeo recibió, a nivel de doctorado, una Innovative Training Network Joint Doctorate (ITN-JD-TCCM) en el periodo 2015-2019, también coordinado por la UAM y con una financiación de 3.8 millones de Euros. En esta iniciativa de doctorado Europeo participaron las siguientes universidades del programa: Barcelona, País Vasco, Valencia y UAM, junto con las universidades de Groningen, Leuven, Pisa, Perugia, Porto, Toulouse, Paris VI, Viena y Estocolmo. Nueve de las tesis presentadas en el programa de doctorado en el curso 2018-2019 fueron realizadas en cotutela por estudiantes financiados por ese programa internacional, además los cursos de formación organizados beneficiaron a otros estudiantes del programa ya que las actividades de la ITN estuvieron abiertas a todos los estudiantes del programa de doctorado. Esta red Europea TCCM está permitiendo mantener actualmente muchas colaboraciones a nivel de doctorado entre las universidades implicadas y se sigue trabajando para conseguir un nuevo proyecto de ITN-JD Europeo.

Gestión y desarrollo del programa

A partir del curso 2015-2016, la gestión del programa, al igual que el resto Programas de Doctorado de la UAM se centralizó en la Escuela de Doctorado (EDUAM), creada con el objetivo de potenciar e internacionalizar los estudios de doctorado en la UAM, y que engloba actualmente a 35 Programas de Doctorado. Esta integración del TCCM en la EDUAM está en línea con estrategia de I+D+i de

la UAM uno de cuyos objetivos es la interdisciplinariedad y el fomento de la internacionalización. La pertenencia a una escuela interdisciplinar es un elemento relevante para la calidad de la formación de los doctorandos.

Creemos que el programa está obteniendo muy buenos resultados en lo referente a la calidad de las tesis defendidas y los números de matrícula. En el periodo bajo evaluación se han matriculado un total de 131 estudiantes. Este número está en línea con las previsiones de la memoria de verificación, pero se ha detectado una variación muy fuerte entre las distintas universidades, en general la oferta de plazas recogidas en la memoria de verificación se sobredimensionó por universidad para asegurar que todas las universidades podrían acoger a sus estudiantes en los años donde se les conceden más proyectos de investigación. En general todas las universidades se han mantenido por debajo de esos números, pero en valores razonable, salvo dos extremos:

- La Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Barcelona y la Universidad del País Vasco han tenido mucha demanda, la UAM ha estado siempre al límite de la oferta (6 plazas). En el caso de la Universidad de Barcelona se matricularon en varios cursos más plazas que las previstas en la memoria (6), en dos ocasiones hasta 8 estudiantes, pero en el curso 2019-20 se llegaron a 13. Algo similar ha pasado en la Universidad del País Vasco donde en cuatro ocasiones se ha superado el número de plazas previstas (3). Eso se debe a dos factores: en esas universidades se matriculan en el doctorado estudiantes de otros centros de investigación (CSIC, IMDEA-Nanociencia, Nanogune, DIPC) algunos de los cuales han recibido la mención Severo Ochoa lo que les ha permitido atraer más estudiantes, algunos de los cuales se han orientado a Química Teórica. Además, el Instituto de Química Teórica y Computacional de la Universidad de Barcelona (IQTUB), en el que participan la mayoría de los profesores de la UB del programa, recibió en 2017 la mención María de Maeztu, lo que les permite tener un sistema de becas propio que ha hecho que aumenten considerablemente sus números de matrícula, en especial en el curso 2019-20 donde se adjudicaron las mayoría.

- 2 universidades (Extremadura y Murcia) no obtuvieron demanda ni tuvieron doctorandos en los cursos bajo evaluación. En esas universidades solo hay un grupo de investigación asociada al programa y existe una alta dependencia de que ese grupo tengan candidatos de muy alto perfil y que puedan conseguir una beca tipo FPU, o que obtengan proyecto de investigación nacional con una beca de doctorado asociado al mismo. Estos grupos no han obtenido proyectos nacionales en los últimos años.

En el fondo esta disparidad entre los números entre universidades refleja la distribución de los fondos de investigación en España, donde los fondos de planes básicos han disminuido, pero han aparecido nuevos planes orientados a centros de excelencia. Pese a esos problemas, son precisamente las universidades con menos matrícula las que se benefician mas del programa, ya que sus estudiantes pueden establecer una amplia red de contactos con otros estudiantes del país.

En lo referente tesis defendidas, se han defendido exitosamente 65 tesis doctorales desde la creación del programa y hasta el curso 2020-21 incluido. La tasa de graduación es satisfactoria ya que los plazos, así como la defensa se han cumplido en el tiempo estipulado en la memoria de verificación. La duración media de las tesis se sitúa entre tres y cuatro años. Las tasas de abandono son muy bajas, solo se han dado de baja cuatro matriculados en el periodo de evaluación sobre 131 matriculados (3%). Este dato se explica porque la mayoría de los matriculados tienen ya con una beca cuando se matriculan o se incorporan a proyectos con financiación existente.

En cuanto a las actividades formativas propuestas en la memoria de verificación se puede clasificar en cuatro categorías.

- La internacionalización del alumnado que se refleja en las estancias de investigación realizadas en el extranjero. La mayoría (49/65 un 75%) de todas las tesis defendidas en el periodo de evaluación llevan en su haber al menos una estancia de investigación en centros de prestigio internacional y 44 (el 69%) de ellas obtuvo la mención internacional.

- La difusión de resultados de investigación (publicación de artículos o participación en congresos internacionales) que se han cumplido muy ampliamente, basta con ver la cantidad y calidad de las publicaciones de las tesis leídas (312). En promedio se han publicado 4.86 artículos por tesis y el 76 % están en el primer cuartil.

- La participación en seminarios y cursos. Como se recoge en el autoinforme, se realizan cursos a tres niveles: i) cada universidad organiza seminarios a nivel local y cursos de especialización, dependiendo de las necesidades de cada proyecto y la formación previa de cada doctorando estos cursos están en general dirigidos a completar su formación en técnicas específicas. ii) Se promueve la asistencia a cursos especializados que se imparten a nivel internacional. iii) Se ofrecen cursos de formación transversal organizados por las escuelas de doctorado de cada universidad.

- Una de las señas de identidad del programa es la organización de un workshop anual del programa de doctorado, donde los estudiantes de distintas universidades se pueden conocer de forma presencial y presentar sus resultados. Este workshop se organiza adjunto a una conferencia internacional como parte de su programa. En particular siempre se ha hecho conjuntamente con los congresos ESPA (Electronic Structure Principles and Applications) en años pares o EUCO-CTC (European Conference on Computational and Theoretical Chemistry) en años impares. Por desgracia, y debido a la pandemia no se han podido realizar las dos últimas ediciones, ya que el congreso ESPA-2020 (a celebrar en Vigo) fue pospuesto a 2022 y el 13 EUCO-CTC a celebrar en Chalkidiki, Grecia en 2021 fue pospuesto a 2023. Se valoró la posibilidad de realizar esta actividad on-line, pero se consideró que uno de sus principales atractivos para los estudiantes era precisamente la presencialidad. Se espera retomar la actividad este año en el ESPA-2022 que se celebrará en Vigo del 21 al 24 de Junio. La participación en estos workshops del programa ha sido siempre muy alta (entre 15 y 20 estudiantes se les asigna una presentación oral) y supone contactar también con estudiantes no españoles que realizan su tesis en alguna de las universidades del consorcio Europeo TCCM citadas anteriormente.

Sobre las encuestas de los doctorandos y los directores, se ha detectado como punto débil del programa la baja participación en las mismas, lo que hace difícil tener una visión amplia y significativa de la satisfacción con el programa. Analizando las encuestas obtenidas se observa una satisfacción generalizada en cuanto a adquisición de capacidades y habilidades por parte de los estudiantes de doctorado. Algunas críticas sin embargo vierten sobre la parte burocrática y la tardanza en resolver algunos expedientes, como la defensa de tesis, que dependen de las escuelas de doctorado de cada universidad.

La comisión académica se ha reunido anualmente y las actas correspondientes se adjuntan a este informe. Debido al alto número de universidades que participan en el programa y para asegurar una respuesta ágil a las solicitudes de los doctorandos (en especial admisión, y defensa de tesis) se creó una subcomisión delegada de la comisión académica que ha funcionado correctamente.

DIMENSIÓN 1. Gestión del título

Criterio 1. ORGANIZACIÓN Y FUNCIONAMIENTO

EL TÍTULO SE HA IMPLANTADO DE ACUERDO AL DISEÑO APROBADO EN LA MEMORIA VERIFICADA Y/O SUS POSTERIORES MODIFICACIONES, ASEGURANDO QUE SE CUMPLEN LOS OBJETIVOS DEL PROGRAMA, QUE LAS ACTIVIDADES FORMATIVAS, EL APRENDIZAJE Y LA EVALUACIÓN SON ADECUADOS Y QUE SE APLICAN DE MANERA CONSISTENTE LOS REQUISITOS DE ACCESO Y ADMISIÓN.

1.1. El acceso y admisión al programa, y los complementos formativos cursados por los estudiantes se han desarrollado adecuadamente. Se debe mostrar que el programa de doctorado ha dispuesto de mecanismos que garanticen que el perfil de ingreso de los doctorandos sea adecuado y que su número sea coherente con las líneas de investigación del programa. Se debe valorar si el número de estudiantes de nuevo ingreso admitidos en el Programa de Doctorado no supera el previsto en la memoria de verificación para las diferentes modalidades y si la distribución de estudiantes entre las distintas líneas de investigación es coherente con las características del programa de doctorado. Además, se debe valorar el funcionamiento de los criterios de admisión al programa y si el perfil de los estudiantes de nuevo ingreso admitidos coincide con el descrito en la memoria verificada. Finalmente

se valorará la correcta asignación de los complementos formativos (si procede) y la pertinencia de los mismos en coherencia con el perfil de ingreso de los estudiantes al programa de doctorado.:

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: En la memoria de verificación se indicó una oferta de plazas total de 55 plazas anuales de nuevo ingreso en el conjunto de las universidades participantes. Esta oferta se estimó teniendo en cuenta por tamaño de las universidades participantes y la trayectoria previa del programa de doctorado preexistentes. Para la UAM, UCM, UB y la UV, las universidades con más grupos del consorcio y mas tradición en captar estudiantes de doctorado en el programa TCCM, se acordó una oferta de 6 plazas cada una. Mientras que para el resto de las universidades la oferta se dejó en 3. En el caso de las Universidades de Oviedo y Vigo esta oferta se subió a 5 plazas, teniendo en cuenta el número de grupos de esas universidades y la historia previa de estudiantes de doctorado que habían tenido.

Como se puede apreciar en las tablas de datos de ingreso y matrícula (Tabla1), el número de nuevos estudiantes admitidos en la UAM, la Universidad de Barcelona (UB) y la UPV han cumplido las expectativas, incluso en la UB y UPV en bastantes ocasiones cursos se han superado el número de plazas ofertadas. Sin embargo, el resto de las universidades colaboradoras en el programa los números no alcanzaron lo esperado llegando en el caso de las universidades de Murcia y Extremadura a no tener demanda en ningún curso. Esto hace que planteemos acciones de mejora del programa, adaptando mejor la oferta de plazas ofertadas a la realidad actual de las universidades, rebajando las plazas ofertadas a una para las universidades que no han tenido alumnos y ajustar el número en algunos que obtuvieron pocos admitidos y aumentando la oferta de la UPV.

Hay que indicar que es difícil prever el número de plazas que se demandarán en años sucesivos, la gran parte de los estudiantes realizan la inscripción una vez que consiguen una plaza en alguno de los grupos que pertenecen al programa o en centros de investigación donde hay grupos de investigación fuertes en Química Teórica (CSIC, IMDEA, DIPC...) y el número de becas que se obtienen cada año es muy variable dependiendo las convocatorias de los planes regionales, nacionales o europeos de investigación. Como ejemplo paradigmático la Universidad de Sevilla sólo ha matriculado a un estudiante en los años objeto de evaluación, por lo que parecería razonable reducir su oferta a uno, sin embargo, en el curso 2014/15 matriculó a tres estudiantes y en el curso 2015/16 a dos, estudiantes que han estado activos y leído las tesis en el periodo evaluado. En el lado contrario la concesión en 2017 del reconocimiento de centro María de Maeztu a los investigadores de la Universidad de Barcelona, a través del IQTCUB ha provocado que aumente el número de matriculados de forma muy significativa especialmente en el curso 2019/20, ya que ese programa lleva asociado la concesión de becas de doctorado. Otros centros en los que participan investigadores del programa están también optando al reconocimiento Maria de Maeztu, por lo que de obtenerse aumentaría su matrícula. Es importante hacer notar que se está observando una tendencia constante a aumentar el número de alumnos en el programa, del orden de 18 en los primeros años de implementación del mismo (cursos 2014/15 y 2015/16) a valores del orden de 25 en los dos siguientes cursos y llegando a 30 o superándolos en las dos últimas ediciones. Creemos que este aumento refleja la importancia creciente que está alcanzando la simulación en el ámbito de la Química, su aplicación a sistemas cada vez mas extensos y realistas ha hecho que en las últimas ediciones tengamos estudiantes con becas de doctorado industrial o en proyectos cofinanciados con la industria. Pese a las dificultades indicadas para hacer previsiones a medio/largo plazo es evidente que se hace necesario revisar la oferta de plazas.

Sobre la tasas de abandono, debemos señalar que durante el periodo de evaluación sólo 4 de 131 estudiantes (3%) abandonaron la realización de la tesis o por razones personales o por falta de financiación. Esta baja tasa de abandono se debe a que la mayoría de los admitidos provienen del Master de Química Teórica y Modelización Computacional, conocen ya a los grupos de investigación y tienen una idea muy clara de las líneas generales del proyecto a desarrollar. Al ser un máster de dos años también provoca que muchos estudiantes se incorporan al final segundo año del máster, en el que ya han podido solicitar una beca de investigación (el requisito para solicitar una beca es tener 60 ECTS aprobados a nivel de máster), por lo que en el momento de la solicitud ya saben que cuentan con financiación para realizar la tesis. Mas del 87% -114/131- de los estudiantes realizan la tesis con financiación, en general becas de doctorado o contratos de proyecto y casi todos ellos desde muy al principio de su incorporación al programa) .

La elección de una línea de investigación por parte del estudiante viene dada en primera instancia por el proyecto de tesis y bajo las directrices del director. La diversidad de las líneas de investigación que se han propuesto en programa y que engloban los temas más actuales de la química teórica y la modelización computacional están abiertas en todas las universidades del consorcio, aunque algunas universidades están más orientadas hacia determinados temas por la naturaleza de los equipos de investigación involucrados. A continuación, se muestra el porcentaje de doctorandos implicados en cada línea en el periodo evaluado, observándose una distribución homogénea entre las tesis activas durante el periodo de evaluación, lo que nos lleva a concluir que las líneas de investigación propuestas inicialmente estaban bien diseñadas:

- 1 - Estructura molecular y reactividad química 16 (12 %)
- 2 - Desarrollo de métodos de simulación en química 17 (13%)
- 3 - Estados excitados y fotoquímica 9 (7%)
- 4 - Química organometálica computacional 11 (9%)
- 5 - Bioquímica computacional 25 (20%)
- 6 - Procesos inducidos por láseres 11 (9%)
- 7 - Sólidos y superficies 18 (14%)
- 8 - Estudio de nuevos materiales 29 (15%)

Respecto a los perfiles de estudiantes admitidos, según la memoria de verificación se recomienda que los estudiantes que accedan al doctorado hayan cursado previamente un grado en Química, Física, Ciencias de los materiales o áreas afines y la posterior realización del máster de Química Teórica y Modelización Computacional. Según la tabla aportada para el perfil de ingreso de los dos últimos años (Tabla 2) de 62 estudiantes 47 habían realizado un grado en Química, 8 en Física, 3 un doble grado en Química y Física y 3 otros grados relacionados con Bioquímica, es decir el 93.5% entraron en el doctorado con el perfil recomendado para el grado. Más de la mitad 34/62 (54%) de los estudiantes matriculados los dos últimos cursos han cursado el máster TCCM. Sólo en dos casos en los dos últimos años se detectaron deficiencias en su formación previa por los que se le recomendó hacer complementos formativos en asignaturas del máster TCCM. Se concluye en vista de estos datos, que la gran mayoría de estudiantes han seguido los perfiles previstos. La existencia del máster TCCM facilita enormemente la asignación de complementos formativos, para aquellos alumnos que no conocen el uso de las técnicas básicas de Química Teórica, el fundamento de los métodos o ambos.

En cuanto a los criterios de admisión la subcomisión académica delegada del doctorado analiza en detalles las solicitudes y las evalúa atendiendo a los criterios de admisión recogidos en la memoria de verificación (los porcentajes indicados no estaban en la memoria, pero son los que se usan de forma aproximada):

- Las calificaciones obtenidas en el grado y/o máster que haya realizado (55%)
- Las publicaciones en revistas y comunicaciones a congresos realizadas, en especial las derivadas de la tesis de fin de máster (15 %)
- Certificado de nivel de inglés, mínimo recomendado B2 (10%)
- Carta de referencia de dos profesores (10%)
- Otros méritos relevantes alegados en su CV (10%)

Aunque, como se ha dicho, la mayoría de las solicitudes provienen del máster TCCM se aceptaron otras provenientes de otros másteres más generalistas o especializados en otras áreas como los másteres de química física, simulación, bioinformática o de nanoquímica entre otros. Muchos de los estudiantes habían realizado másteres donde la simulación juega un papel importante. Hay que tener en cuenta que un número significativo de estudiantes provienen de sistemas educativos distintos al español.

1.2. La comisión académica se ha constituido de forma correcta y ha funcionado adecuadamente. Se debe demostrar la adecuación del perfil de los constituyentes de la comisión académica, la representatividad de las líneas de investigación en la misma y su ajuste a la normativa durante la totalidad del período evaluado. Además, se debe valorar el buen funcionamiento de la comisión académica teniendo en cuenta aspectos como la periodicidad de sus reuniones, la pertinencia de las decisiones adoptadas y la adecuación y buen funcionamiento del procedimiento utilizado para la asignación de tutor y director de tesis del doctorando (cumplimiento de plazos, adecuación del perfil investigador del director a la materia de la tesis). En esta directriz también se debe valorar la adecuación y buen funcionamiento del procedimiento para el control del DAD y la certificación de los datos que en él se contienen, el procedimiento para la valoración anual del plan de investigación, el procedimiento de presentación y aprobación para la lectura de tesis doctorales, y la adecuación de todos estos aspectos a lo previsto en la memoria verificada.:

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: La actual comisión Académica (CA) del programa de doctorado está formado por un presidente perteneciente a la universidad coordinadora y vocales que son coordinadores locales del programa en sus respectivas universidades.

La Composición de la comisión es la siguiente (ver EOS3):

Presidente: Manuel Alcamí Pertejo (Coordinador del programa)

Vocal: Al Mokhtar Lamsabhi (Universidad Autónoma de Madrid)

Vocal: Mercè Deumal (Universidad de Barcelona)

Vocal: Pablo García Fernández (Universidad de Cantabria)
Vocal: Francisco Javier Aoiz (Universidad Complutense)
Vocal: Manuel Ángel Aguilar Espinosa (Universidad de Extremadura)
Vocal: Joaquín Ortega Castro (Universidad de las Islas Baleares)
Vocal: Raquel Castillo Solsona (Universidad Jaime I de Castellón).
Vocal: Adolfo Bastida Pascual (Universidad de Murcia)
Vocal: Ángel Martín Pendas (Universidad de Oviedo)
Vocal: José Javier López Pestaña (Universidad del País Vasco/EHU)
Vocal: Enrique Sánchez Marcos (Universidad de Sevilla)
Vocal: Enrique Ortí Guillén (Universidad de Valencia)
Vocal: Marcos Mandado Alonso (Universidad de Vigo)

Además, en el programa de doctorado se cuenta con un personal de Administración y Servicio, Wilson de León Rodríguez, contratado por la universidad coordinadora para dar apoyo en exclusiva a los programas de máster y doctorado TCCM. Esa persona participa también en todas las reuniones de la comisión académica.

Todos los miembros de la comisión cumplen los requisitos de tener al menos un sexenio de investigación y su último sexenio está vigente. La mayoría (9) son catedráticos con más de 4-5 sexenios de investigación y han sido IP de proyectos y tienen al menos una tesis doctoral dirigida. Todos ellos actúan como coordinadores del programa dentro de su universidad de origen. Dentro de la comisión se nombra un representante para cada línea de investigación, basándose en la línea en la que trabaja cada representante, hay que tener en cuenta que casi todos ellos trabajan en más de una línea (la Tabla 3a contiene sólo la línea principal de trabajo), y el grado de desarrollo que tiene esa línea de investigación en la universidad de origen. En estos momentos los representantes son:

- 1- Estructura molecular y reactividad química (Marcos Mandado Alonso)
- 2- Desarrollo de métodos de simulación en química (Ángel Martín Pendas)
- 3- Estados excitados y fotoquímica (Mercè Deumal)
- 4- Química organometálica computacional (Raquel Castillo Solsona)
- 5- Bioquímica computacional (José Javier López Pestaña)
- 6- Procesos inducidos por láseres (Francisco Javier Aoiz)
- 7- Sólidos y superficies (Pablo García Fernández)
- 8- Estudio de nuevos materiales (Enrique Ortí Guillén)

De esta forma se garantiza la representatividad de todas las líneas de investigación en la comisión académica, aspecto que se ve reforzado por el hecho de que, como se ha indicado, la mayor parte de los miembros de la comisión son profesores con una dilatada experiencia que trabajan o han trabajado en más de una de las líneas de investigación indicadas.

La comisión tradicionalmente de forma presencial una vez al año, dado el alto número de universidades participantes era difícil organizar más reuniones, ya que asisten todos los miembros. A raíz de la pandemia se ha replanteado el tipo de reunión previendo en un futuro hacer 2 o 3 reuniones al año y sólo una de ellas presencial. Se adjuntan las actas de las distintas reuniones que han tenido lugar en los últimos años.

Para asegurar que se contesta con agilidad a las solicitudes de los estudiantes, se crea la subcomisión académica delegada de la comisión académica de cinco personas, compuesta actualmente por Manuel Alcamí, Al Mokhtar Lamsabhi, Mercè Deumal, Enrique Sánchez Marcos y Wilson de León (como PAS). Esta comisión se reúne de manera permanente para contestar a las distintas solicitudes de que se reciben por parte de los estudiantes: admisión, asignación de director y tutor, solicitud de lectura de tesis...

El procedimiento que se establece es que cada vez que llega una solicitud, la recibe el personal de administración, quién se encarga de comprobar que la documentación está completa y distribuirlos a los miembros de la subcomisión. Los miembros de esta analizan la documentación cada vez que se recibe y se reúne telemáticamente para tomar una decisión. En caso de dudas se consulta con los miembros de la comisión académica de forma telemática. En la creación de la subcomisión académica delegada y los procedimientos, se estableció que el plazo de contestación debería ser inferior a una semana, plazo que se ha cumplido en casi todos los casos.

- PROCEDIMIENTOS DE ADMISIÓN Y DE ASIGNACIÓN DE TUTOR Y DIRECTOR

Como en casi todas las disciplinas científicas el estudiante viene habitualmente avalado por un profesor del PD que se

compromete a dirigir su tesis y con el que el estudiante ha contactado previamente. En casi todos los casos además ha conseguido o está solicitando una beca dentro de un proyecto de investigación para hacer el doctorado, por lo que la temática de la tesis es siempre consistente con la experiencia y los proyectos de investigación del posible director. Toda esa información se consigna en la solicitud de admisión.

La asignación del proyecto, director y tutor viene en prácticamente todos los casos precedida por la concesión o solicitud de una beca de investigación, por lo que el papel de la subcomisión académica que lo aprueba es verificar que el estudiante cumple los requisitos de admisión y se ratifican el proyecto de investigación y se asigna como director de la tesis a un investigador implicado en el proyecto que avala al estudiante. En caso de que se considere necesaria una cotutela se indica en el documento de solicitud de admisión.

La subcomisión académica delegada asigna un tutor, que puede coincidir o no con el director. En el caso de que la tesis se vaya a realizar en un centro de investigación se asigna siempre como tutor a un profesor de la universidad donde se inscribe la tesis y que conozca o trabaje en temas similares al del director.

Podemos concluir que en la gran mayoría de los casos la asignación de director es una ratificación de un acuerdo previo entre estudiante e investigador sin que ello suponga menoscabo a que haya estudiantes que tengan el derecho de los estudiantes a solicitar y obtener su ingreso en el programa de doctorado sin haber contactado antes con un profesor, en caso de darse esa posibilidad la comisión redirige primero al estudiante a profesores que trabajan en la temáticas de su interés, para que pueda implicarse en un grupo y buscar posibilidades de financiación, ya que la realización de una tesis en este campo requiere necesariamente el acceso a infraestructuras científicas como centros de computación.

El procedimiento de asignación de tutor y director es muy sencillo y se cumple sin dificultad dentro de los plazos fijados.

Igualmente, los cambios de tutor o director son excepcionales y se deben más a circunstancias sobrevenidas que a problemas asociados con la realización de la tesis.

- PROCEDIMIENTO DE CONTROL DEL DOCUMENTO DE ACTIVIDADES

Cada universidad tiene habilitado un sistema para recoger las actividades que el estudiante va realizando durante su tesis doctoral (en el caso de la UAM la plataforma habilitada es SIGMA). Esto permite a cada estudiante mantener actualizado su Documento de Actividades (DAD), incluyendo la posibilidad de mostrar actividades en curso de realización. Una vez que el estudiante sube una nueva actividad a la plataforma esta ha de ser verificada por el tutor, quien comprueba que la actividad está dentro de las contempladas en el programa y que está certificada y documentada adecuadamente.

Cada coordinador local del programa tiene acceso a los expedientes del doctorando y al DAD, lo que permite un seguimiento eficiente de las actividades de los estudiantes aun a pesar del elevado número de tesis doctorales en curso. Este seguimiento es esencial para la evaluación adecuada en tiempo y forma de las distintas tutelas anuales que se aprueban por los coordinadores locales. Las ocho actividades formativas planteadas en la memoria de verificación son muy pragmáticas (asistencia a seminarios, cursos y congresos, publicaciones, presentación de seminarios, estancias de investigación y participación en el workshop del programa de doctorado), por lo que son fáciles de seguir y evaluar por las comisiones académicas locales. La decisión de las comisiones locales son ratificadas por la comisión académica delegada y anualmente la Comisión Académica Nacional recibe los DAD aprobados para hacer un seguimiento y juzgar la correcta evolución del doctorando.

- PROCEDIMIENTO DE VALORACIÓN ANUAL DEL PLAN DE INVESTIGACIÓN

Cada universidad establece los momentos en los que se realiza la evaluación anual del plan de investigación de los doctorandos (aprobación de tutelas). En el caso de la UAM se establecen 3 periodos al año. Dado los diferentes tiempos que maneja cada universidad estos se evalúan y aprueban por las comisiones académicas locales, en caso de encontrar deficiencias se comunican para su corrección y en caso de necesidad se consulta con la subcomisión académica. Las aprobaciones realizadas a nivel local se informan y ratifican por la subcomisión académica delegada. Anualmente la Comisión Académica Nacional recibe los planes de investigación aprobados para hacer un seguimiento y juzgar la correcta evolución del doctorando.

- PROCEDIMIENTO PARA LA APROBACIÓN DE LA LECTURA DE TESIS

El procedimiento de aprobación de la lectura de tesis está fijado por las normativas de cada universidad, pero antes de la presentación de una tesis en alguna de las universidades se solicita a la subcomisión académica delegada del programa la aprobación de la misma, con el fin de garantizar que la coordinación del programa está puntualmente informada de las tesis que se van presentando.

1.3. Las actividades formativas propuestas en la memoria de verificación se han desarrollado e implementado conforme a lo establecido en la Memoria verificada. Se debe valorar la correspondencia de las actividades formativas con las establecidas en la última memoria verificada del programa, su adecuación al nivel MECES 4 y a los objetivos del programa, además de sus procedimientos de control.:

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: En la memoria de verificación del programa de doctorado se establecieron las siguientes 8 actividades formativas 4 (doctorado) y adaptadas a las características y a la investigación en el campo de la Química Teórica.

AF1- Asistencia a seminarios de investigación

AF2- Asistencia a cursos especializados

AF3- Presentación de trabajos en congresos científicos nacionales o internacionales

AF4- Preparación y presentación de dos seminarios formales.

AF5- Asistencia a la reunión anual del doctorado (Workshop internacional) organizado por el programa de doctorado.

AF6- Elaboración de trabajos publicables en revistas de difusión científica.

AF7- Estancias de investigación en centros extranjeros

AF8- Formación transversal

En la Tabla 5 se han recogido las actividades realizadas en las distintas universidades (una pestaña por universidad) para las actividades AF1, AF2, AF3 y AF8. Las actividades correspondientes a la reunión anual del doctorado se recogen en la primera pestaña al ser una actividad común. En el caso de las universidades de Islas Baleares, Murcia y Extremadura no se ha incluido la información al no tener estudiantes matriculados en los cursos 2019-20 o 2020-21.

Como se puede ver en la Tabla se están desarrollando de una manera muy satisfactoria las actividades previstas en la memoria de verificación. En particular:

- La asistencia a seminarios de investigación (AF1), se hace a nivel local. Casi todas las universidades realizan ciclos de seminarios a nivel de Departamento. El número de seminarios es variable dependiendo de la universidad, pero suele ser del orden de 1 al mes (8-10 por año). Eso es especialmente cierto en las universidades mas grandes (UAM, UB, UCM) donde hay una mayor capacidad de atraer a profesores invitados o en universidades como UPV o Valencia, que tienen grandes centros de investigación (DIPC; NanoGune, BioGune o ICMOL y cuyos ciclos de seminarios se ofertan también para los estudiantes del programa). En muchas ocasiones (por ejemplo, en la UAM) en estos ciclos de conferencias se combinan seminarios impartidos por profesores del departamento, con profesores visitantes y seminarios impartidos por los propios estudiantes de doctorado, contribuyendo así a cubrir también la actividad AF4. Se ha detectado una deficiencia y es que estos ciclos de seminarios locales no quedan recogidos en un documento donde se indiquen los seminarios realizados, las fechas de estos y la asistencia, lo que permitiría justificar mejor el cumplimiento de la AF1. Además, durante los últimos años y debido a la pandemia, muchos se han hecho on-line, lo que hubiera abierto la posibilidad de compartir estos seminarios y que pudieran acudir a seguirlos doctorandos de otras universidades. Ambos aspectos se implementarán a partir de ahora.

- Todas las universidades fomentan que los estudiantes realicen cursos de formación (actividad AF2) en su campo de especialización, tanto desplazándose fuera de su universidad, como en la propia universidad o centros cercanos. Por ejemplo, la UAM organiza cursos en Quantum Computing orientados a estudiantes de distintas ramas de ciencias, varias universidades (UB, UPV) imparten cursos de interés general en "big data" o "machine learning" y los propios departamentos y profesores implicados en el programa organizan cursos para formar a sus estudiantes que se abren a todos los estudiantes del programa. Dado el alto grado de especialización requerido hoy en día en una tesis doctoral es también habitual que los estudiantes realicen cursos en otras universidades o centros europeos. En ese sentido un número significativo de estudiantes han realizado cursos organizados por el CECAM (Centro Europeo de Cálculo Atómico y Molecular), que es el centro de formación de referencia en esta área de investigación en Europa y con el que se colabora activamente. Algunos cursos organizados en uno de los nodos, como "Dynapeutics Summer School", organizado desde la UPV se diseñan para ser ofertados a todos los estudiantes del programa. Hay que indicar que, en los años evaluados, la situación de pandemia provocó que muchos cursos programados pasasen a hacerse on-line a partir de Marzo de 2020.

- Prácticamente todos los estudiantes del programa van a al menos a un congreso al año (AF3) que en general es un congreso de carácter internacional. En algunos nodos se ha indicado en la Tabla 5 el detalle de esos congresos y en otros se ha agrupado la información de forma genérica. Además, muchos de los grupos de investigación participan activamente en redes nacionales (la Xarxa en Química Teórica y Computacional en Cataluña o la red de jóvenes investigadores en Física Atómica y Molecular son buenos ejemplos) y europeas (como las redes COST), que fomentan la participación de estudiantes a nivel de doctorado. Es difícil detallar en las tablas todos los congresos a los que han asistido todos los estudiantes, pero un análisis de una muestra amplia de estudiantes indica que cada estudiante participa durante su tesis doctoral en 4 o 5 congresos.

- La reunión anual del doctorado (Workshop internacional) organizado por el programa (AF5), es una de las piedras angulares del mismo, ya que supone la participación de los asistentes en un congreso internacional (EUCCO-CTC o ESPA, contribuyendo a la AF3) y supone que normalmente y al menos una vez durante su doctorado el estudiante tenga que presentar los resultados de su

investigación ante un foro de expertos (contribuyendo a la AF4). Pero, sobre todo, supone el momento en que una gran mayoría de estudiantes del programa se reúnen para presentar y debatir los resultados alcanzados hasta el momento en su tesis entre ellos y con expertos de prestigio internacional presentes en los congresos asociados (las reuniones están abiertas a todos los participantes del congreso asociado). Como es obvio esta reunión tiene también como objetivo el que los estudiantes del programa desarrollen una red de contactos, que sin duda les ayudará en su futura etapa postdoctoral. Dada la importancia de esta actividad en el programa se presenta como documento adjunto el programa de todas las reuniones realizadas entre 2016 y 2019. Por desgracia y debido a la pandemia no fue posible hacer esa reunión ni en 2020, ni en 2021, pero se espera retomarla en junio de 2022 junto al congreso ESPA que se celebrará en Vigo.

- Respecto a la actividad AF6, se discute más adelante en detalle al presentar los resultados de las tesis leídas (Tabla 6), en esa Tabla se observa que todas las tesis leídas han dado lugar a publicaciones en revistas internacionales. Una gran mayoría en revistas del rango Q1. Desde la creación del programa las 65 tesis leídas han dado lugar a 312 publicaciones, es decir 4.8 publicaciones por tesis. Es evidente que la actividad formativa 6 "elaboración de trabajos" se cubre ampliamente en el programa.

- La actividad AF7 (estancias en el extranjero) es otra actividad ampliamente cubierta por una gran cantidad de estudiantes. De hecho, todos los grupos participantes poseen redes amplias de contactos internacionales y se fomenta la realización de estancias de al menos 3 meses y al menos una durante la duración de la tesis. Cabe destacar que, de las tesis leídas desde la creación del programa de doctorado, en la mayoría (49/65 un 75%) de todas las tesis defendidas en el periodo de evaluación se ha realizado, al menos, una estancia de investigación en centros de prestigio internacional en el extranjero y 45/65, el 69%, tienen la mención internacional (cumpliéndose casi el ambicioso objetivo que se planteaba en la memoria de verificación con respecto a esta actividad formativa de llegar al 75%). Eso a pesar de que en los dos últimos años la movilidad ha estado muy limitada por la pandemia.

- Por último, y como se puede comprobar en la tabla 5, las universidades participantes ofertan una amplia variedad de oferta de formación transversal (AF9), en muchas ocasiones como parte de las actividades de formación docente y muy orientada también al desarrollo de habilidades y el aprendizaje de técnicas y recursos de carácter general. Esta oferta de cursos es aprovechada en muchas ocasiones por los estudiantes del programa. Como es de esperar esta oferta es mucho más amplia en las universidades mas grandes que participan en el programa.

Creemos que todos estos datos muestran que el programa ofrece a los doctorandos unas opciones de formación muy amplias y que siguen lo diseñado en la memoria de verificación. Hay que resaltar que casi todos los estudiantes realizan casi todas las actividades formativas y cumplen holgadamente el requisito de 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.

El papel del director y del tutor en la supervisión de la realización de estas actividades formativas es esencial. El compromiso por parte de directores y tutores en la supervisión y orientación del estudiante y las obligaciones de este último se refleja en un Compromiso Documental que contiene un código de buenas prácticas

Todas las universidades tienen implementado una plataforma habilitada para la gestión del Documento de Actividades del Doctorando (DAD), que facilita enormemente su seguimiento y ulterior evaluación.

VALORACIÓN GLOBAL DEL CRITERIO 1. ORGANIZACIÓN Y FUNCIONAMIENTO::

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: A la vista de lo expuesto en la autoevaluación de los criterios parciales 1.1, 1.2 y 1.3, se considera que este criterio se logra completamente, tal y como se muestra en las evidencias descriptivas directas y en las constatables en la documentación anexa.

El cumplimiento del plan de actividades por parte de los estudiantes se adecúa a lo previsto en la Memoria de Verificación del Programa de Doctorado. Es de destacar el alto cumplimiento de los aspectos de internacionalización, estancias en el extranjero y participación en congresos. Destacamos también el importante papel de la reunión anual de doctorandos, pese a no ser estrictamente obligatoria todos los estudiantes tratan de acudir al menos una vez durante el desarrollo de su tesis, y la mayoría lo hace al menos dos veces. También detectamos un muy buen nivel de publicación de los resultados de investigación.

Al realizar este ejercicio de evaluación nos ha sorprendido muy positivamente que un número muy significativo de estudiantes realizan actividades transversales de formación. Es de destacar el esfuerzo que se está haciendo en todas las universidades en

ampliar esa oferta y la calidad de las mismas, lo que se está reflejando en un creciente interés de los estudiantes en realizarlas.

En lo relativo a la admisión de estudiantes, se detecta una polarización entre las universidades mas grandes, que cubren bien su oferta, incluso la superan, frente a las mas pequeñas que se quedan lejos de cubrirla pese a que la oferta es la mitad que las anteriores. Es especialmente preocupante el hecho de que tres universidades no estén captando ningún estudiante en los últimos años. La obtención de grandes proyectos de investigación (mención Ramiro Maeztu o becas ERC por parte de algún investigador) hace que sea razonable plantear la redistribución de la oferta académica entre las universidades del programa, aumentándola en algún nodo y disminuyéndola en otros.

El programa de doctorado tiene una muy buena capacidad de atracción de estudiantes, nacionales e internacionales, motivados y deseosos de realizar tesis doctorales en una temática, la simulación a nivel molecular, que está claramente en expansión y aplicándose cada vez más a sistemas reales de interés. Destacamos también la perfecta adecuación los perfiles de ingreso a las características del programa, la existencia de un máster de dos años en la misma temática y en el que participan muchas de las universidades del programa hace que casi todos los estudiantes entren ya con un muy buen nivel de base, y puedan centrarse desde un primer momento en su proyecto de investigación. El hecho de que el master del que provienen muchos estudiantes sea de dos años favorece también que los estudiantes entren el programa con una beca concedida o con muy buenas perspectivas de obtenerlas, reduciendo mucho la tasa de abandono.

Finalmente, queremos destacar la calidad investigadora, docente y de gestión de los miembros de la Comisión Académica y de los coordinadores locales. El trabajo por medio de una subcomisión delegada, que se reúne por medios telemáticos ha permitido agilizar

los procesos criterios de admisión y de asignación de tutor y director a los nuevos estudiantes. Las labores de supervisión, seguimiento y evaluación, aunque dependen en última instancia de la Comisión Académica interuniversitaria, se realizan en la práctica por medio de los coordinadores locales, permitiendo resolver los posibles problemas en cuanto se detectan. Esta agilidad en los procedimientos redunda en los estudiantes de doctorado que tienen siempre una referencia cercana a la que acudir en caso de problemas.

Criterio 2. INFORMACIÓN Y TRANSPARENCIA

LA INSTITUCIÓN DISPONE DE MECANISMOS PARA COMUNICAR DE MANERA ADECUADA, CLARA, PRECISA Y OBJETIVA LAS CARACTERÍSTICAS DEL PROGRAMA Y LOS PROCESOS QUE GARANTIZAN SU CALIDAD PARA TODOS LOS GRUPOS DE INTERÉS.

2.1. La universidad ha dispuesto de mecanismos para comunicar una información completa y actualizada sobre las características y resultados del programa de doctorado, así como de los procesos que garantizan su calidad. Se debe valorar la difusión y publicidad del programa, su identidad, la información disponible sobre el acceso y admisión, sobre las actividades formativas, acciones de movilidad, personal docente e investigador del título, infraestructuras, servicios y dotaciones, normativa e información oficial, así como sobre el sistema de garantía de calidad de la titulación.:

B: El estándar para este criterio se logra completamente.

Justificación de la valoración: La información sobre el programa de doctorado se encuentra en las páginas de las Escuelas Doctorales de cada universidad. En el caso de la Universidad Autónoma de Madrid se puede consultar en el siguiente enlace:

UAM - Escuela de Doctorado - Química Teórica y Modelización Computacional

[https://www.uam.es/EscuelaDoctorado/\(es_ES\)-Programa-de-Doctorado-en-Qu%C3%ADmica-Teórica-/1429099824013.htm?language=es_ES&nDept=4&pid=1429099816822&pidDept=1429099821833](https://www.uam.es/EscuelaDoctorado/(es_ES)-Programa-de-Doctorado-en-Qu%C3%ADmica-Teórica-/1429099824013.htm?language=es_ES&nDept=4&pid=1429099816822&pidDept=1429099821833)

A esta web se puede acceder directamente desde la página web de la Universidad Autónoma a través del menú Estudios->Escuela de Doctorado, que redirige a la página de la Escuela de Doctorado de la UAM. Esta web está disponible tanto en español como en inglés y en ella se puede encontrar toda la información necesaria sobre el programa (admisión, matrícula, requisitos y documentación necesaria). Para los doctorandos existe un menú "Doctorando" donde pueden encontrar la información sobre el seguimiento de sus estudios, el compromiso documental, la mención internacional, el calendario, etc.

En la página específica del programa se encuentra el nombre del coordinador, un folleto informativo del programa, acceso a la memoria de verificación del título, al informe de evaluación de la ANECA, la resolución de la verificación y un enlace al Registro de Universidades, Centros y Títulos (RUCT). También se encuentran listadas las líneas de investigación del programa.

Como se comentó, cada universidad tiene una web propia siendo algunos ejemplos los siguientes:

- Universidad del País Vasco: Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional - Doctorado - UPV/EHU
- Universidad de Valencia: Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional (uv.es)
- Universidad de Sevilla: Química Teórica y Modelización Computacional. Plan 2011 - EIDUS

Los estudiantes que deseen información pueden escribir a dos direcciones de correo emtccm@uam.es y tccm.jd@uam.es. La primera de las direcciones es la más conocida del programa ya que también se utiliza para dar información sobre el máster en Química Teórica y Modelización Computacional. Además, la UAM como institución coordinadora cuenta con dos gestores contratados para gestionar el máster y el doctorado facilitando así la comunicación con los interesados. Para promocionar el programa de máster/doctorado se ha creado una cuenta en Twitter https://twitter.com/EM_TCCM.

En este punto cabría destacar la ventaja que se tiene al tener un programa de máster-doctorado que actúan conjuntamente. El programa de máster no solo forma investigadores en el campo de la Química Teórica, sino que también nutre de alumnos al programa de doctorado lo cual es una ventaja debido a la especificidad de este campo. Otro punto importante a mencionar es la internacionalización. Durante el periodo 2015-2018 se nos concedió una Innovative Training Network Joint Doctorate (ITN-EJD-TCCM, <https://cordis.europa.eu/project/id/642294/es>) a 4 de las 13 universidades nacionales (Universidad Autónoma de Madrid, Universidad de Barcelona, Universidad del País Vasco y Universidad de Valencia). Bajo el paraguas de esta acción, gracias a su financiación, se realizaron distintas actividades de promoción del programa general. Una prueba de ello es la organización de un curso "Core Course" en septiembre de 2015 donde los doctorando ITN y los del programa tuvieron la oportunidad de interactuar a través de distintos seminarios. Se impartió un tutorial sobre publicaciones científicas, otro sobre gestión de proyectos, otro sobre comunicación y difusión de la ciencia y también se organizó el workshop anual de los estudiantes de doctorado.

Nuestros estudiantes también han participado en la Semana de la Ciencia, se ha tenido una newsletter escrita directamente por los doctorandos (anexo 2) y han escrito artículos divulgativos en la web TCCM Archives - Mapping Ignorance (<https://mappingignorance.org/category/quantum-chemistry/tccm/>) bajo la etiqueta TCCM.

En la actualidad se está trabajando en una web común del programa en www.tccm.es. Hasta el 2018 existió dicha página, pero asociada también al proyecto ITN. Al finalizar dicho proyecto, en diciembre del 2018, se decidió transferir el contenido para que estuviera adaptada únicamente al programa interuniversitario. Actualmente la web está en mantenimiento, ya que se detectó que tenía información incompleta y poco ágil y se está rediseñando completamente para incluir de forma integrada los datos de todas las universidades: tesis en marcha, enlace a repositorios de las tesis leídas, información y enlaces a los grupos de investigación que participan en el programa, a los workshops internacionales... En la nueva estructura de la web se potenciará la sección de noticias para anunciar seminarios, lecturas de tesis, ofertas de becas, pero también resultados como publicaciones en revistas internacionales. En el diseño que se está haciendo esa sección de noticias estará conectada a redes sociales, especialmente twitter y LinkedIn, donde el posgrado TCCM ya tiene una presencia importante, especialmente debido al programa de master Erasmus Mundus (@EM_TCCM en twitter y EMTCCM como red de antiguos alumnos en LinkedIn con 150 seguidores). Se espera que esté completamente operativa en Abril de 2022, hasta entonces se ha dejado la página web de la escuela de doctorado de la UAM como página activa del programa de doctorado donde los interesados pueden encontrar la información básica.

VALORACIÓN GLOBAL DEL CRITERIO 2. INFORMACIÓN Y TRANSPARENCIA::

B: El estándar para este criterio se logra completamente.

Justificación de la valoración: El título ofrece información pública adaptada a los diferentes públicos del programa. La información se proporciona en inglés y en español dado el alto número de estudiantes extranjeros, alrededor de un 25%, matriculados en el programa (ver tabla 1). Por un lado, está toda la información relativa al proceso de admisión, incluyendo la información relativa a la documentación que se debe aportar, y por otro está la información sobre el seguimiento que tendrá un estudiante una vez esté matriculado en el programa. Esta información la pueden encontrar en las páginas de las distintas Escuelas Doctorales de los nodos que conforman el programa. Esas páginas contienen también información útil para tutores y directores. Además, y como punto de mejora, se está trabajando en un rediseño completo de la página web propia del programa (www.tccm.es) donde se potenciará la visibilidad del programa con una sección de noticias conectada con redes sociales, en especial twitter. Esa página se está realizando completamente en inglés ya que uno de sus principales objetivos es potenciar la visibilidad internacional del programa de doctorado.

Criterio 3. SISTEMA DE GARANTÍA INTERNO DE CALIDAD (SGIC)

LA INSTITUCIÓN DISPONE DE UN SISTEMA DE GARANTÍA INTERNA DE LA CALIDAD FORMALMENTE ESTABLECIDO E IMPLEMENTADO QUE PERMITE RECOPIRAR, ANALIZAR Y USAR LA INFORMACIÓN PERTINENTE PARA LA GESTIÓN EFICAZ DEL PROGRAMA DE DOCTORADO Y REALIZAR EL SEGUIMIENTO, LA EVALUACIÓN Y LA MEJORA CONTINUA.

3.1. El SGIC puesto en marcha dispone de un órgano responsable en el que se encuentran representados los principales agentes implicados en el programa de doctorado. Se debe valorar que el órgano responsable del SGIC haya realizado un adecuado seguimiento interno del programa dando respuesta a las recomendaciones y advertencias de los agentes implicados, que haya propuesto actualizaciones y modificaciones y que desde el SGIC se coordine la propuesta de planes de mejora o memorias de calidad que recojan las actuaciones acordadas, además del funcionamiento del sistema de quejas, reclamaciones y sugerencias. En el caso de programas

interuniversitarios, se debe valorar el funcionamiento de los mecanismos y procedimientos de coordinación entre las universidades participantes.:

B: El estándar para este criterio se logra completamente.

Justificación de la valoración: La Escuela de Doctorado Multidisciplinar de la UAM (EDUAM) se crea en diciembre de 2015 con el objetivo de organizar, gestionar, coordinar y supervisar los estudios de doctorado de la UAM dentro del marco de la estrategia de investigación de la UAM. La Escuela de Doctorado agrupa los 35 Programas de Doctorado (PD) de la UAM en las cinco ramas de conocimiento (Artes y Humanidades, Ciencias, Ciencias de la Salud, Ciencias Sociales y Jurídicas, e Ingeniería). El carácter multidisciplinar de la Escuela de Doctorado de la UAM pretende fomentar la búsqueda de sinergias y posibilidades de colaboración entre los diversos PD integrados en ella, y quiere potenciar la visibilidad internacional de sus Programas de Doctorado, mediante la difusión de su actividad de formación e investigación y de sus resultados. La EDUAM proporciona, así mismo, una estructura coordinada de gestión académico-administrativa de los PD que la integran, con el fin de organizar y racionalizar el uso de los recursos que la UAM destina al doctorado, de facilitar, simplificar y dar apoyo a la realización de estas tareas por parte de todo el personal implicado, y de ofrecer una mejor atención a los doctorandos.

Entre estas tareas se encuentra el diseño y la implementación del Sistema Interno de Garantía de Calidad (SGIC) de los PD de la UAM. El SGIC es la herramienta de la que se dota la EDUAM para garantizar la calidad de sus PD y también de la investigación que se desarrolla en las tesis doctorales y las actividades formativas de este período, y establece un procedimiento de funcionamiento interno y un conjunto de procesos orientados a la mejora continua. El Comité de Dirección, máximo órgano de decisión de la EDUAM, aprobó en su reunión del 18/12/2018 el documento que identifica el órgano responsable del SGIC de los programas de doctorado, define la estructura y el reglamento del citado órgano, y articula la participación de los responsables académicos, los estudiantes, el PDI, el PAS y otros agentes externos. De acuerdo a dicho documento, los órganos encargados del SGIC son el Comité de Dirección de la EDUAM, la Comisión de Garantía de Calidad (CGC) de la EDUAM, la Comisión Académica (CA) del PD y el Coordinador del PD.

Este documento define, así mismo, 1) Los procedimientos para la recogida de información y análisis de la calidad del programa de doctorado en lo que respecta al acceso y admisión de doctorandos, el desarrollo del programa, los resultados de rendimiento académico, y los recursos humanos y materiales; 2) Los procedimientos para la recogida de información y análisis de la calidad del programa de doctorado en lo que respecta a la valoración de la actividad científica, que se concretará en las contribuciones científicas de doctorandos, docentes e investigadores implicados en el programa; 3) La especificación del modo en el cual se utilizará la información citada en los puntos anteriores en la revisión y mejora del programa formativo. Esencialmente, hace recaer sobre los vicerrectorados con competencias en materia de estudios de posgrado, de investigación, de seguimiento y calidad de los estudios y de la estadística universitaria, la elaboración de manera centralizada de los indicadores incluidos en el Catálogo de indicadores de PD, así como su inclusión en la plataforma institucional de seguimiento de planes; y asigna a la CA el análisis de dicha información, su valoración con respecto a los objetivos propuestos en la memoria de verificación y sucesivos seguimientos, y la redacción del informe anual de seguimiento y el plan de mejora asociado.

Los indicadores de seguimiento, control y evaluación para la elaboración de dichos informes corresponden a las áreas de: 1. Acceso, 2. Desarrollo del programa de doctorado, 3. Rendimiento académico, 4. Abandono, 5. Recursos humanos y materiales, 6. Acciones de movilidad de los doctorandos, 7. Inserción laboral de los egresados, y 8. Satisfacción de los colectivos implicados, las sugerencias y reclamaciones y la información en la web sobre el PD.

La Comisión Académica del doctorado realizó un primer informe anual de seguimiento (EOS8) en el curso 2020 - 2021. En dicho documento se incluyeron datos no solo del mencionado curso, sino también del programa retrospectivamente hasta el curso 2016 - 2017. En diferentes partes de este informe de autoevaluación, se han tenido en cuenta las conclusiones fundamentales de este análisis, y se han mencionado algunas de las acciones de mejora propuesta

Tratándose de un programa interuniversitario, es importante valorar el funcionamiento de la Comisión Académica del programa donde están representadas las 13 universidades. También es importante destacar la actividad diaria que tiene la Subcomisión Académica, encargada de la gestión de las solicitudes de admisión, seguimiento de los doctorandos y las defensas de las tesis. No siempre la coordinación entre 13 universidades es fácil, pero el sistema de comunicación vía email con la Subcomisión Académica ha probado ser eficiente y de utilidad.

El procedimiento habitual de nuestro programa es que si un doctorando tiene alguna sugerencia o queja primero deberá dirigirse a su Coordinador Local para. Una vez hecho esto, la reclamación/sugerencia se elevará a la Comisión Académica del programa. Si el doctorando considera que el Coordinador Local no es imparcial frente a lo que tenga que decir, puede elevar su reclamación/sugerencia directamente a la Comisión Académica a través del correo tccm.jd@uam.es Además de este canal, cada universidad cuenta con un buzón de reclamaciones/sugerencias (ver ESO-9). Por ejemplo, la UAM tiene implementado para sus estudios de Grado, Posgrado y Doctorado un sistema único de gestión de quejas, reclamaciones y sugerencias del que es responsable el Área de Planificación y Calidad de los Servicios (APCS), dependiente de la Gerencia de la UAM. Tanto la Web de la EDUAM como la del PD incluyen un enlace que da acceso al inicio del proceso de presentación de quejas/sugerencias en la sede

electrónica de la UAM. La CA ha solicitado la información relativa a quejas y sugerencias relacionadas con el PD a la APCS, que ha confirmado la ausencia de contribuciones en este sentido durante todo el periodo objeto de evaluación en este informe (evidencia EOS-9)

3.2. El SGIC implementado dispone de procedimientos para la recogida y análisis de la satisfacción de los doctorandos, tutores, directores, doctores egresados, así como de otros grupos de interés para supervisar el desarrollo del Programa de doctorado, analizar sus resultados y determinar las actuaciones oportunas para su mejora. Se debe valorar especialmente el funcionamiento de los mecanismos de recogida de información sobre el funcionamiento de la comisión académica, el seguimiento del DAD y de su plan de investigación, la evaluación de los resultados del programa de doctorado, y la propia difusión de sus resultados.:

B: El estándar para este criterio se logra completamente.

Justificación de la valoración: El SGIC es la herramienta por la que la Escuela de Doctorado de la UAM (EDUAM) puede garantizar la calidad de sus programas de doctorado. Uno de los aspectos fundamentales del SGIC es la recogida y análisis de la satisfacción de los doctorandos, tutores, directores, doctores egresados, así como de otros grupos de interés para supervisar el desarrollo del PD, analizar sus resultados y determinar las actuaciones oportunas para su mejora. En el caso de la EDUAM, se ha habilitado un procedimiento a través de encuestas individuales a los doctorandos y directores de tesis en el PD.

En el curso 2019 - 2020 la EDUAM realizó las encuestas a los doctorandos del programa de la UAM así como también a los doctorandos de las otras 12 universidades. Para ello remitió a las distintas Escuelas de Doctorado los siguientes formularios:

□ Encuesta intermedia de doctorandos

https://docs.google.com/forms/d/1Gu2UKPQE_B3vA3X_yeCPaiG6-04GT4IRI_PUmK29jMA/viewform?edit_requested=true

□ Encuesta final de doctorandos

https://docs.google.com/forms/d/1j-cRmaUhPX7ueBmYt_dObT2iuZLcNCjZ7ULceRdXXw/viewform?edit_requested=true

□ Encuesta directores

https://docs.google.com/forms/d/1IP3C_jx7gmfM2qwkBq4tz5bBEwMMzARE7E7fa8-YQvM/viewform?edit_requested=true

Los modelos utilizados, así como los resultados de las mismas pueden ser consultados en la evidencia EOS13. Los resultados muestran una baja participación tanto de los doctorandos como de los directores por lo que una de las acciones de mejora que se ha planteado la Comisión Académica es una mejor promoción de las encuestas, así como la implementación de un calendario para las mismas. Dicha centralización se llevaría a cabo por cada uno de los Coordinadores locales. Los nodos se encargarían de que sus estudiantes y directores participaran activamente en las encuestas, esto se podría realizar estableciendo en el calendario una actividad de "Encuestas" donde los estudiantes acudan a un aula de informática tras alguna actividad común, como lo puede ser un seminario de grupo, para que las completen in situ.

Con respecto a la evaluación de los resultados del programa y su difusión, el mecanismo de recogida básico en el que nos centramos es en el número de publicaciones asociadas a tesis doctorales. En este aspecto, tal como se comenta en el punto 6, el programa está en una posición muy buena dado el alto número de publicaciones. Otro mecanismo que destacar es la participación de nuestros doctorandos en congresos y seminarios. Ambas contempladas dentro del plan de actividades del programa.

VALORACIÓN GLOBAL DEL CRITERIO 3. SISTEMA DE GARANTÍA INTERNO DE CALIDAD (SGIC)::

B: El estándar para este criterio se logra completamente.

Justificación de la valoración: El SGIC es la herramienta de la que se dota la EDUAM para garantizar la calidad de sus PD y también de la investigación que se desarrolla en las tesis doctorales y las actividades formativas de este período, y establece un procedimiento de funcionamiento interno y un conjunto de procesos orientados a la mejora continua. El Comité de Dirección, máximo órgano de decisión de la EDUAM. Los órganos encargados del SGIC son el Comité de Dirección de la EDUAM, la Comisión de Garantía de Calidad (CGC) de la EDUAM, la Comisión Académica (CA) del PD y el Coordinador del PD. El SGIC hace recaer sobre los vicerrectorados con competencias en materia de estudios de posgrado, de investigación, de seguimiento y calidad de los estudios y de la estadística universitaria, la elaboración de manera centralizada de los indicadores, y asigna a la CA el análisis de dicha información, su valoración con respecto a los objetivos propuestos en la memoria de verificación y sucesivos seguimientos, y la redacción del informe anual de seguimiento y el plan de mejora asociado.

Tras la aprobación del SGIC en diciembre de 2018, cada CA ha asumido el liderazgo de su implantación, con vistas a la elaboración de un primer informe de seguimiento de su programa. La implementación del SGIC ha puesto a disposición de la CA información de gran utilidad para el análisis y seguimiento del PD y para los procesos de Seguimiento Externo como el proceso de Renovación de la Acreditación. Las conclusiones fundamentales de este análisis se han presentado en diferentes secciones de este Informe de Autoevaluación y se han incorporado como acciones de mejora. Cabe destacar, tratándose de un programa interuniversitario, el buen funcionamiento de los mecanismos de coordinación entre las diferentes Universidades y de la ausencia de quejas entre los distintos colectivos involucrados.

La reflexión sobre los propios mecanismos de seguimiento, que se han desarrollado por primera vez para este informe, confirma

la validez de los mismos, tanto para la evaluación de desarrollo del programa, de sus resultados o del grado de satisfacción de los actores implicados (doctorandos y directores).

DIMENSIÓN 2. Recursos

Criterio 4. PERSONAL ACADÉMICO

EL PROFESORADO HA DE POSEER LA FORMACIÓN ADECUADA Y EXPERIENCIA INVESTIGADORA ACTUALIZADA PARA CUMPLIR LOS OBJETIVOS DEL PROGRAMA DE DOCTORADO, Y HA DE SER SUFICIENTE EN NÚMERO Y DEDICACIÓN PARA CUBRIR LAS TAREAS PRINCIPALES DEL PROGRAMA: LA TUTORÍA, LA DIRECCIÓN DE TESIS, LA IMPARTICIÓN Y LA EVALUACIÓN DE LAS ACTIVIDADES FORMATIVAS, Y LA GESTIÓN DEL PROGRAMA.

4.1. El personal académico del título ha sido suficiente y adecuado en términos de formación y experiencia investigadora, y su número y perfil investigador es coherente con las características del programa de doctorado y suficiente para el número de doctorandos matriculados. Se debe valorar que un porcentaje mínimo del 60% de los investigadores doctores participantes en el programa posean experiencia investigadora vigente acreditada, que cada uno de los equipos de investigación que conforman el programa cuenta con, al menos, un proyecto competitivo en ejecución en temas relacionados con las líneas de investigación del programa, que las líneas de investigación asociadas a los equipos de investigación mantienen su vigencia y calidad investigadora, y la adecuación del perfil investigador de los tutores y directores de tesis a los objetivos y naturaleza del programa.:

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: El programa de doctorado cuenta con amplio y variado espectro de profesores repartidos por todo el territorio español. La calidad investigadora del profesorado es excelente como se puede contrastar en los diversos indicadores presentados tanto en la memoria de verificación como en el presente informe (Tablas 3a y 3b). Se dividen en dos categorías profesores propios y profesores o investigadores invitados a participar en el programa en calidad de directores o codirectores de las tesis doctorales. Los profesores propios pertenecen a la Universidades implicada en el programa. Cabe destacar que algunos profesores propios incluidos originalmente en la memoria de verificación han causado baja en el programa por jubilación o por traslado. También se han incorporado nuevos investigadores especialmente jóvenes de gran nivel a través de diversas vías (Programas Ramón y Cajal, Programa Talento de la comunidad de Madrid, Programas propios de las universidades participantes...). La inmensa mayoría de los investigadores externos a las universidades provienen de centros de excelencia en investigación ya bien establecidos como son IMDEA o CSIC. También hay mencionar los colaboradores extranjeros que son expertos con rango de catedrático en sus Universidades y con los que se colabora en tesis en cotutela internacional. Podemos citar la Universidad de Viena, la Universidad de Leuven, la Universidad de Porto, la Universidad Pisa o la Universidad de Burdeos entre otras.

En las tablas 3a y 3b anexas a este informe están recogidos todos los investigadores y profesores que han sido propuesto inicialmente así que las nuevas incorporaciones que se han incluido posteriormente. Es difícil cuantificar las publicaciones de todos los miembros participantes en el PD ya que el promedio de la producción por autor suele rondar una docena de artículos anual de gran calidad. Sin embargo, sí podemos explorar la calidad en sus recientes publicaciones el 95 % están en el primer cuartil. Podemos encontrar artículos publicados en revistas con alto índice de impacto como pueden ser Nature, Science, Science Advance, ACS Catalysis entre otros.

El personal académico se incrementó de 72 propuestos en la memoria de verificación a 124 activos actualmente. Si añadimos los 63 jóvenes investigadores y colaboradores externos, nos encontramos con 187 científicos involucrados en el desarrollo de la carrera científica de los estudiantes de doctorado. Del total de los investigadores 136 (un 73%) han dirigido o están en la actualidad dirigiendo alguna tesis. El reparto de los directores por líneas de investigación está equilibrado como se muestra en el siguiente análisis:

Línea 1: 25 %, Línea 2: 13 %, Línea 3: 9 % , Línea 4: 8 %, Línea 5: 20 %, Línea 6: 5% , Línea 7: 12 %, Línea 8: 17 %.

Hay que señalar que en las tesis defendidas en el periodo evaluado estuvieron involucrados 90 profesores 55 profesores propios del PD y 35 colaboradores externos. Aproximadamente el 70% de las tesis presentadas han tenido director y codirector y un número significativo se ha hecho en cotutela internacional.

Es importante indicar que los grupos implicados en el programa tienen amplias fuentes de financiación para llevar a cabo los

proyectos de tesis como también para ofertar becas de doctorado (ver la tabla 4). Los directores del programa cuentan con proyectos activos como investigadores principales o como participantes. Participan o han participado durante el curso de las tesis en 203 proyectos de investigación competitivos. 23 de los cuales son proyectos internacionales (ERC, Marie-Curie, COST ...). El número de proyectos por investigador es muy alto y muestra la capacidad del programa de doctorado en ofertar plazas en las diferentes líneas de investigación.

VALORACIÓN GLOBAL DEL CRITERIO 4. PERSONAL ACADÉMICO::

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: Existen múltiples indicadores que ponen de manifiesto el grado de calidad del personal académico implicado en el programa de doctorado. En su inmensa mayoría se trata de personal con una altísima capacidad investigadora refrendada por su alto número de publicaciones y el elevado número de proyectos de investigación competitivo que se consiguen entre los profesores del programa. Además todos ellos participan habitualmente impartiendo conferencias en conferencias internacionales y disponen de una amplia red de contactos internacionales.

El número y el impacto de las publicaciones obtenidas en las tesis doctorales (ver Tabla 6) es una muestra de la alta calidad de los grupos de investigación y el alto nivel de implicación en la dirección por parte del personal académico.

El programa atrae, además, a un gran número de investigadores externos de alto nivel lo que es reflejo de las amplias redes de colaboración de los grupos implicados en el programa.

Criterio 5. RECURSOS, PERSONAL DE APOYO, Y FINANCIACIÓN

EL PERSONAL DE APOYO, LOS RECURSOS MATERIALES Y LOS SERVICIOS PUESTOS A DISPOSICIÓN DE LOS ESTUDIANTES SON SUFICIENTES Y ADECUADOS AL NÚMERO DE DOCTORANDOS Y A LAS CARACTERÍSTICAS Y ÁMBITO DEL PROGRAMA. LA UNIVERSIDAD DISPONE DE SERVICIOS DE ORIENTACIÓN Y APOYO AL DOCTORANDO.

5.1. Los recursos materiales y el equipamiento disponibles deben haber sido suficientes para garantizar el desarrollo de la investigación de los doctorandos y adecuados para cada una de las líneas de investigación previstas en el programa. Asimismo, se debe valorar que el personal técnico de apoyo implicado en el programa ha sido suficiente y está adecuadamente capacitado, y que la universidad dispone de servicios de orientación y apoyo al doctorando y que éstos han funcionado apropiadamente.:

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: Las Universidades participantes ofrecen diversos recursos generales a los investigadores con el objetivo que los trabajos de investigación transcurren en las mejores condiciones.

Para desarrollar sus trabajos de investigación los doctorandos y doctorandas han tenido acceso en cada universidad a lo siguiente:

- Un puesto de trabajo en su universidad dotado 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.
- Recursos computacionales a través de centros locales o autonómicos. Por ejemplo, el Centro de Computación científica de la Universidad Autónoma de Madrid. el CESGA en Galicia...
- Acceso a la Red Española de Supercomputación a través de proyectos liderados por los investigadores de los distintos grupos de investigación.
- El Software necesario para realizar su tesis doctoral

Todos los estudiantes del programa de doctorado tienen acceso a revistas electrónicas a través de la base "web of knowledge" o "Scopus" vía la fundación española de ciencias y tecnología (FECYT).

Para el desarrollo de las actividades formativas se cuenta también en todas las universidades con:

- Aulas de propósito general dotadas con: pizarras, ordenador, video proyector y conexión física a internet.
- 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. Esa aula se usa presencial o remotamente en los cursos asociados al doctorado.

En el resto de las universidades asociadas se cuenta con aulas de informática y máquinas de cálculo con acceso a los programas de cálculo necesarios para realizar la tesis.

- 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 aparcamiento 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 periodo formativo (máster) en el programa y que ha defendido su tesis. 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.

- El servicio de tecnología de la información que esta presente en todas las universidades del consorcio proporciona asistencia en diversos temas relacionadas con la gestión de los recursos informáticos y de telecomunicación (acceso a eduroam, programas básicos de ofimática, Matlab..., así como servicios de alojamiento de datos en la nube). También ofrece un catalogo de licencias de software para usos institucional por parte del personal universitario, así como la asistencia en su instalación y su mantenimiento.

En cuanto al personal técnico las universidades ponen a disposición su personal de administración y servicio a los doctorandos en sus tramites burocráticos y para adaptarse al entorno donde están desarrollando su tesis. El personal de las Escuelas de Doctorados de las Universidades asociadas al programa ha sido siempre de gran ayuda, en especial el de la Escuela de Doctorado de la UAM que como universidad coordinadora centraliza algunos de los trámites.

Las universidades que pertenecen al consorcio disponen 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.

5.2. El programa ha dispuesto de una financiación apropiada para el desarrollo de las actividades de formación y movilidad. Se debe valorar la suficiencia y adecuación de la financiación y los recursos externos disponibles para la realización de las acciones formativas previstas, así como el apoyo para la asistencia a congresos y estancias en el extranjero. Asimismo, se debe valorar la suficiencia del número de ayudas y contratos de investigación conseguidos para los estudiantes matriculados.:

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: Prácticamente todos los estudiantes inscritos en el programa 114/131 (87%) han disfrutado de algún tipo de financiación durante el desarrollo de sus tesis doctorales. Los mas comunes son las becas FPU/FPI procedentes del ministerio de ciencias o contratos de los propios proyectos de investigación de los directores de tesis. También hubo becas procedentes de las universidades, la UAM o la Universidad de Barcelona, otorgan desde hace años becas de doctorado a sus estudiantes más excelentes para que puedan seguir sus estudios superiores también ha habido becas procedentes de fondos autonómicos (Generalitat de Catalunya, Gobierno vasco...) y del centros de excelencia Maria de Maeztu (Instituto de Química Teórica i Computacional de la UB) o Severo Ochoa (IMDEA-Nanociencia, DIPIC). En especial desde la concesión al IQTCUB de la mención María de Maeztu ha tenido un enorme impacto en el programa al ser un centro dedicado específicamente al campo de Química Teórica.

Dado el alto número de estudiantes y nuestra incapacidad de desglosar el tipo de becas en las universidades del consorcio no podemos calcular los porcentajes y las procedencias de la totalidad de la financiación de los estudiantes matriculados en el periodo de evaluación. Hay que resaltar, que tal y como se indicó en el punto anterior, el personal académico es receptor de un altísimo número de proyectos de investigación lo que incluye en muchas ocasiones la capacidad de ofertar contratos predoctorales. También la existencia de estos proyectos ha permitido que muchos de los estudiantes hayan sido financiados mediante más de un mecanismo, permitiendo contratar al doctorando antes de conseguir una beca FPI/FPU o extender su contrato al finalizar la beca.

Además del salario percibido por los doctorandos, muchas de estas fuentes de financiación incluyen fondos específicos para financiar asistencias a congresos. Los estudiantes utilizan habitualmente la dotación para viajes y dietas de los proyectos de investigación a los que están adscritos, que cuentan en general con una buena financiación. A esto hay que añadir la

disponibilidad en muchas universidades de solicitar por parte de los doctorandos una bolsa de viaje anual para financiar la asistencia a congresos científicos, condicionada a la presentación de una comunicación. La suficiencia de los recursos disponibles para estos capítulos queda manifiesta en el número de estancias realizadas en otras instituciones, así como en el de comunicaciones presentadas a congresos.

Generalmente los contratos doctorales provenientes de proyectos europeos o nacionales incluyen fondos específicos para financiar viajes y estancias en otros centros. Estas dotaciones suelen cubrir estancias de 3 meses y de hecho en 49 de las 65 tesis leídas (75%) se realizaron esas estancias de investigación.

VALORACIÓN GLOBAL DEL CRITERIO 5. PERSONAL DE APOYO, RECURSOS Y SERVICIOS::

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: Para el programa de química teórica y modelización computacional es imprescindible poseer una infraestructura informática potente para el desarrollo de los trabajos de investigación. Actualmente, las universidades implicadas cuentan con un potencial de calculo de alto rendimiento con diversos centros de computación en las universidades y el acceso a la red española de supercomputación, que unido a la infraestructura propia de los grupos permite tener recursos suficientes para desarrollar los proyectos de tesis.

Los estudiantes tienen a su disposición recursos mas que suficientes para su trabajo diario (puesto de trabajo personal, acceso a programas de ofimática y cálculos computacional, servicios de red....)

Además de estos recursos físicos y computacionales, la mayoría de los estudiantes están financiados por becas que cubren los gastos de movilidad, tanto de asistencia a congresos como de estancias largas en otros centros. Los grupos donde se integran los estudiantes cuentan, en general, con buenas fuentes de financiación (reflejada en 203 proyectos competitivos nacionales e internacionales) y están bien conectados internacionalmente lo que permite que una gran mayoría de estudiantes (75%) realice estancias en el extranjero durante su tesis y vaya a una media de más de un congreso por año.

DIMENSIÓN 3. Resultados

Criterio 6. RESULTADOS

LOS RESULTADOS DEL PROGRAMA DE DOCTORADO VALORADOS A TRAVÉS DE LAS TESIS DEFENDIDAS, LOS VALORES DE LOS INDICADORES DE LA CALIDAD DEL PROGRAMA, ASÍ COMO EL GRADO DE INTERNACIONALIZACIÓN DEL MISMO SON ADECUADOS, EN COHERENCIA CON EL ÁMBITO TEMÁTICO DEL TÍTULO.

6.1. Los resultados obtenidos tras la implantación del programa y su grado de internacionalización han sido adecuados. Se debe valorar el número de tesis defendidas anualmente y la calidad de las contribuciones derivadas de las mismas, la evolución de los indicadores sobre el rendimiento académico (tasa de abandono, éxito y duración media), el grado de adecuación de las tesis al ámbito científico del programa, así como los datos de inserción laboral de los egresados del programa de doctorado en los tres años posteriores a la defensa de la tesis doctoral. El grado de internacionalización del programa se debe valorar a través de la participación de profesores y estudiantes internacionales y de las actuaciones de movilidad y otras actividades internacionales, siempre en coherencia con el ámbito disciplinar del programa.:

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: 6.1a ANÁLISIS CUANTITATIVO DE LAS TESIS DEFENDIDAS Y CALIDAD DE LAS MISMAS

Uno de los éxitos que consideramos más significativos del PD es el alto número de estudiantes que optan por él. Hay que recordar que esta es tradicionalmente una disciplina con poco atractivo para los estudiantes de Química, debido los conocimientos que requiere de física y matemáticas. Esa es la razón principal por la que se creó en 1998 este programa como interuniversitario y lo que ha hecho que perviva con éxito después de casi 25 años.

Los números de matrícula han crecido desde unos 20 por año (21 y 18 en los cursos 2014-15 y 2015-16 respectivamente) a 30 en los dos años últimos bajo evaluación (34 y 28 respectivamente). Estos números van en paralelo al de los estudiantes del master TCCM, mostrando que cada vez esta área atrae a más estudiantes. Por una parte, este aumento se debe a la calidad de los

grupos que cada vez consiguen captar mas fondos en proyectos, pero también porque los estudiantes lo empiezan a ver con grandes posibilidades de aplicación a sistemas reales y con salidas profesionales fuera de la academia. Un número cada vez más significativo de estudiantes vienen con perfiles de bioquímica y se orientan hacia el diseño de fármacos, la modelización de procesos bioquímicos o el diseño de nuevos materiales. También se empieza a notar un número todavía pequeño, pero creciente, de estudiantes implicados en doctorados industriales o muy orientados a aplicaciones en la industria. Todos estos datos nos hacen pensar que la demanda del programa de doctorado puede seguir creciendo en los próximos años a un ritmo similar.

En cuanto a las tesis leídas, en general, los estudiantes tardan 4 años en promedio en presentar la tesis, que coincide con el tiempo de las becas predoctorales (una excepción fueron los estudiantes con becas de la ITN que tenían que presentar la tesis en 3 años). La gran mayoría de los estudiantes son capaces de terminar la tesis en cuatro años y con un alto grado de calidad. Desde la creación del programa y hasta el curso 2020-21 incluido se han presentado y defendido 65 tesis doctorales.

El dato más significativo para medir la calidad de las tesis es el nivel de las publicaciones obtenidas:

- Todas, salvo una que dio lugar a una publicación, han dado lugar a al menos dos publicaciones en revistas internacionales (ver Tabla 6) y 15 de ellas han dado lugar a 7 o más publicaciones.
- Se han publicado 312 artículos con una media de 5 artículos por tesis. El 76 % de las publicaciones están en revistas del primer cuartil Q1 y el 20 % están en el segundo cuartil Q2.

Además 59 tesis recibieron la máxima calificación de sobresaliente cum laude y 45 la mención internacional.

6.2 Internacionalización y Actividades de formación de los Doctorandos:

Las estancias de investigación son el gran reflejo de la internacionalización del programa de Doctorado. Esta es una señal de identidad del programa de doctorado en primer lugar porque el programa en si mismo ha tenido siempre una vocación de colaboración con otras universidades europeas. Prueba de ello, es que el master TCCM se realiza en colaboración con un gran consorcio en el que participan 24 universidades europeas de 5 países y que fue a partir de ese consorcio donde se genero el proyecto ITN-Joint Doctorate TCCM en el que participaron 13 universidades europeas de 8 países. En ese proyecto 9 tesis se presentaron en cotutela internacional dentro de este PD y muchas de esas colaboraciones siguen vigentes y dan lugar a nuevas cotutelas. En total 12 de las tesis leídas hasta el curso 2020-21 han sido realizadas en cotutela internacional.

También prueba de esta internacionalización es el hecho de que 32 de los 131 estudiantes del programa (24%) son extranjeros, muchos de ellos vinieron a Europa a través del programa de master Erasmus Mundus. Este programa ha crecido mucho en la última concesión (2020-2025) pasando de becar a 6-7 estudiantes internacionales al año a becar del orden de 20-25 estudiantes al año. Es de esperar que cuando la primera generación de estos estudiantes becados EM terminen el master a final del curso 2021-22, se notará en el programa de doctorado un aumento significativo de estudiantes extranjeros, ya que muchos de ellos quieren seguir haciendo un doctorado en Europa y vienen con expedientes muy altos, debido a lo exigente del proceso de selección en los programas EM.

Las colaboraciones también se reflejan en las estancias internacionales que realizan los estudiantes: 49 de ellos han realizado estancias de más de tres meses en el extranjero en centros de prestigio internacional (el 74 % de todas las tesis defendidas), eso pese a las limitaciones en la movilidad de los dos últimos años. 45 de ellas obtuvieron la mención internacional.

El workshop anual del PD se organiza junto con los congresos internacionales ESPA y EUCO-CTC precisamente como una forma de potenciar el carácter internacional del programa. En él siguen participando estudiantes de las universidades con las que se colaboró en la red ITN-TCCM. Formativamente es una experiencia muy importante para los estudiantes, ya que presentan sus resultados en un foro internacional y debaten sus trabajos de investigación ante una audiencia no solo de sus pares en el PD, sino también con científicos de prestigio internacional. Esta actividad está especialmente bien valorada por estudiantes, directores y tutores porque es muy difícil que un estudiante de doctorado tenga la opción de realizar una presentación oral en un congreso internacional de prestigio. Dada su importancia se recoge en un anexo los programas de los workshops organizados. Por desgracia se pararon en las dos últimas ediciones debido a la pandemia, pero se van a volver a celebrar en Vigo en Junio de 2022 y en Grecia en 2023. Además, se fomenta la participación de los estudiantes en redes, congresos y reuniones internacionales especialmente dirigidos a jóvenes investigadores en el área.

También se ha velado a nivel local por ofertar una formación adecuada, en particular: se han organizado cursos de especialización orientados a las necesidades específicas de cada proyecto; se realizan ciclos de seminarios a nivel local; se

promueve la asistencia a cursos especializados en otras instituciones internacionales y se anima a realizar actividades de formación transversal organizadas por las escuelas doctorales. La asistencia a estas actividades ha sido siempre elevada y muchos de los estudiantes han realizado al menos un curso de formación fuera de España o en un ambiente internacional durante su doctorado.

En general se promueve que los estudiantes vayan a un congreso una vez cada año, para presentar sus resultados. La inmensa mayoría de los estudiantes disponen de financiación para ir a ellos.

6.1c la Adecuación del ámbito Científico del Programa:

Las líneas de investigación elegidas en la memoria de verificación se diseñaron para cubrir a todos los grupos implicados. Es difícil englobar los 187 investigadores implicados en el programa bajo pocas líneas de investigaciones. Las 8 líneas de investigación propuestas han mostrado ser adecuadas ya que la distribución de las tesis defendidas y en curso es bastante equilibrada como se observa en la Tabla-EOS1.

No hay que olvidar que, aunque las tesis defendidas están asignadas a una línea de investigación, en la mayoría de los casos abordan al menos otra línea. Son muy normales los proyectos de tesis que combinan por ejemplo: estructura molecular con nuevos materiales, bioquímica computacional con estado excitados y fotoquímica o desarrollo de métodos de simulación con procesos inducidos por láseres). El carácter interdisciplinar de la Química Teórica, se refleja en las tesis que se desarrollan. Esto hace que el ámbito de investigación del estudiante este abierto a diferentes campos, lo que es muy enriquecedor para los estudiantes, ampliando su visión e incrementando sus opciones de salidas profesionales al acabar el doctorado.

6.1d Inserción laboral de los egresados y satisfacción con el programa.

Lamentablemente no se ha llevado cabo ningún estudio específico sobre la inserción laboral de los egresados. Sin embargo, en ocasión del 20 aniversario de la creación del programa de posgrado (master y doctorado TCCM) se celebró en San Sebastián del 30 de Mayo al 1 de Junio de 2019 la reunión "Theoretical Chemistry and Computational Modeling: 20 years promoting Excellence in Science (20TCCM)". Antes de su celebración se hizo una campaña para localizar y obtener información de la carrera científica seguida a los antiguos alumnos de máster y doctorado TCCM y se creó la asociación de alumni TCCM. Los datos recopilados no son del todo significativos ya que agregan resultados de estudiantes del máster y de programas de doctorado TCCM anteriores al RD 2011. Se detectó que el 75% de los estudiantes del master habían seguido un doctorado (muchos el TCCM) y que de estos, una vez acabado el doctorado el 75% habían elegido un posición postdoctoral en ambientes académicos y el 25% se había inclinado por trabajar en la industria en puestos donde su formación en simulación era valorada.

En un futuro próximo queremos hacer un estudio similar específico para los egresados del PD. También se quiere promocionar la red creada en 2019 de alumni TCCM entre los egresados. Aunque esta red de alumni está abierta muchos de ellos no se integran en ella, por lo que sería importante reactivarla. Por ejemplo, existente el grupo TCCM en linkedin con 150 seguidores, pero muy poco activo en los últimos dos años.

Recopilar el grado de satisfacción de los estudiantes es un punto para mejorar. Se enviaron encuestas a los doctorandos y directores pero las respuestas son insuficientes para sacar conclusiones (EOS-13), lo que nos hace plantear nuevas estrategias de encuestas en los próximos cursos. En directores es algo mejor, los colaboradores externos no contestaron.

VALORACIÓN GLOBAL DEL CRITERIO 6. RESULTADOS::

A: El estándar para este criterio se logra completamente y además existen ejemplos que exceden de los requerimientos básicos y que se indican en el presente Informe.

Justificación de la valoración: Creemos que tesis defendidas hasta este momento en el momento en el programa nos hacen ser muy positivos tanto por la cantidad como por la calidad de las mismas. Además, detectamos un incremento sostenido de este área de investigación que se está reflejando en un número mayor de doctorandos y tesis leídas cada año. Las expectativas futuras para el programa creemos que son muy optimistas.

Además, el 24% de los estudiantes del programa son extranjeros y es de esperar que este número crezca a partir del próximo curso por el impacto del programa de master Erasmus Mundus que está atrayendo a 20-25 estudiantes por año.

Los indicios como el número de publicaciones, citas e impacto de las publicaciones demuestran una alta calidad científica en general de las tesis defendidas hasta el momento.

Las actividades formativas de los doctorandos, están siguiendo lo previsto en la memoria de verificación, todos los estudiantes están cumpliendo los requisitos mínimos de formación y la mayor parte de los estudiantes están muy implicados en realizar actividades formativas, haciendo del orden de al menos 6 de las 8 actividades formativas propuestas.

Entre estas actividades cabe resaltar el elevado número de estancias en otros centros y las comunicaciones a congresos, indicando una buena internacionalización y difusión de los resultados de la investigación.

Los estudiantes del programa están realizando de forma muy satisfactoria las otras actividades formativas propuestas en la memoria de verificación: seminarios locales, cursos de especialización tanto a nivel local como en escuelas internacionales y la realización de cursos de formación transversal ofrecidos por las escuelas de doctorado de sus universidades.

Se valora de forma muy positiva la organización y participación en los workshops internacionales del programa de doctorado y la conveniencia de seguir realizándolos junto a los congresos ESPA y EUCO-CTC.

Como aspectos a mejorar destaca el promover la participación en las encuestas de satisfacción y hacer un seguimiento mas continuado de los egresados promoviendo la red ya creada en 2019 de alumni TCCM.
