

Programa de Doctorado en QUÍMICA TEÓRICA y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL

Sistema Interno de Garantía de Calidad

Informe Anual de Seguimiento y Propuestas de Mejora Curso 2021/22

Elaborado por: Comisión Académica del Programa de Doctorado	Revisado por: Comisión Permanente de la EDUAM	Aprobado por: Comité de Dirección de la EDUAM
Coordinador del Programa Al Mokhtar Lamsabhi Belmeknassi Fecha: 14/06/2023 LAMSABHI BELMEKNASSI AL MOKHTAR - 54837781P Firmado digitalmente por LAMSABHI BELMEKNASSI AL MOKHTAR - 54837781P Fecha: 2023.07.05 10:31:26 +02'00'	Subdirectora de Calidad de la EDUAM Firmado por YOLANDA LEÓN ÁLVAREZ el día 05/07/2023 con un certificado emitido por AC Firmaprofesional - CUALIFICADOS	Director de la EDUAM Firmado por MIGUEL REMACHA MORENO en calidad de DIRECTOR DE LA ESCUELA DE DOCTORADO DE LA \$UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID\$ el

Índice de contenidos

1. Objeto.	2
2. Alcance.....	2
3. Indicadores de seguimiento, control y evaluación	2
4. Análisis de los datos derivados de los indicadores.....	6
5. Identificación de Puntos Fuertes	6
6. Propuestas de Mejora.....	6
7. Documentación de Referencia	8

Objeto.

Este documento se encuadra en el *eje de actividad 8.2*, del *Manual del Sistema Interno de Garantía de Calidad* para los *Programas de Doctorado de la Universidad Autónoma de Madrid*.

El objeto del documento es realizar el análisis y valoración del desarrollo y evolución de los estudios que dan lugar al título de Doctor en Química Teórica y Modelización Computacional y extraer conclusiones a partir de la cuales se elaborarán propuestas de mejora, con el fin de subsanar las posibles deficiencias encontradas.

Alcance.

Este documento será de aplicación en la revisión del cumplimiento de los objetivos del programa en lo referente a:

- 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 de doctorado, los resultados de rendimiento académico, y los recursos humanos y materiales.
- 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.
- La recogida de información y análisis de la calidad del programa de doctorado en lo que respecta a la valoración de las acciones de movilidad en que participen los doctorandos.
- La recogida de información y análisis de la calidad del programa de doctorado en lo que respecta al seguimiento de los doctores egresados, transcurrido un periodo entre doce y dieciocho meses desde la obtención del título.
- La recogida de información y análisis sobre la satisfacción de los grupos de interés, atención de sugerencias y reclamaciones.
- La especificación del modo en el cual se utilizará la información citada en los puntos anteriores, para la identificación de los puntos fuertes y áreas de mejora del programa formativo.

Indicadores de seguimiento, control y evaluación

En este informe se han analizado los indicadores desglosados en 11 de las 13 universidades del programa.

1. Acceso

Cada universidad del Consorcio tiene un número asignado de estudiantes que se pueden admitir. Esta información viene reflejada en la memoria de verificación del programa, en este caso el número total es de 55 plazas. El estudiante solicita la admisión en la universidad en la que quiera realizar el doctorado, por la que finalmente obtendrá el título de doctor.

Comprobada la documentación, y en el caso de que se cumplan los requisitos, la Subcomisión Académica de la universidad en la que se ha solicitado la admisión emite un documento aprobando la admisión.

Admisiones del curso 2021-2022

Las admisiones del curso académico 2021-2022 aparecen desglosadas por universidades en la tabla de abajo; todas las matrículas fueron a tiempo completo.

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Informe anual de seguimiento Curso 2021-2022

La asignación del director/es de la tesis se realizará en el plazo de 3 meses y será la Comisión Académica Local la encargada de ello.

Las características del perfil de ingreso se han mostrado idóneas para la selección de candidatos y no ha habido incidencias o quejas, ni por parte de los alumnos ni por los directores de tesis acerca de disfunciones entre formación y el desarrollo de las tareas doctorales. Esto se debe a que la mayoría de nuestros doctorandos provienen del máster en Química Teórica y Modelización Computacional, el cual aporta la formación necesaria para continuar los estudios de doctorado en este. También hay que comentar que los estudiantes que no acceden desde esta vía provienen de programas similares, y ninguno ha requerido realizar complementos formativos.

La distribución por universidades se presenta en la tabla:

UNIVERSIDAD	OFERTA DE PLAZAS	MATRICULADOS
Universidad Autónoma de Madrid	6	6
Universidad de Barcelona	6	6
Universidad de Cantabria	3	1
Universidad Complutense de Madrid	6	1
Universitat de València (Estudi General)	6	3
Universidad de Vigo	5	3
Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea	3	6
Universidad de Extremadura	3	0
Universidad de las Illes Balears	3	0
Universidad Jaume I de Castellón	3	0
Universidad de Murcia	3	0
Universidad de Oviedo	5	0
Universidad de Sevilla	3	0

De las 55 plazas ofertadas de nuevo ingreso ofertadas se han cubierto 26. Esta cifra es fluctuante, aunque siempre se mueve entorno a los 30 estudiantes, lo que hace pensar que quizás la oferta no esté ajustada a la demanda.

Las universidades de Extremadura y Murcia no han tenido estudiantes en el programa de doctorado. Esto evidencia la necesidad de realizar un estudio sobre los motivos de este hecho para tratar de solventarlo en el futuro siempre que sea posible. Se hará un seguimiento exhaustivo de los datos de matrícula por universidades en los próximos cursos y si se mantiene la baja demanda en algunas de las universidades participantes en el título, se estudiará la posibilidad de realizar una modificación del programa.

2. Desarrollo del programa de doctorado.

En el curso académico al que este informe hace referencia hemos celebrado el workshop anual del doctorado, el 27 de junio de 2022 en Vigo, como una actividad satélite del congreso ESPA:

<https://espa2022.webs.uvigo.es/young-scientists-workshop-on-theoretical-chemistry-and-computational-modelling/>

En el mismo no solo participaron estudiantes de nuestro programa sino también de otros doctorados. En concreto hubo 28 charlas, 36 pósteres y un total de 55 asistentes.

Los doctorandos también han tenido la oportunidad de participar en los seminarios de los departamentos a los que pertenecen. A modo de ejemplo, en la UAM, el Departamento de Química celebró los siguientes seminarios:

-Attosecond and few-femtosecond resolved ultrafast measurements with X-rays. Jon Marangos. Imperial College London. 15/09/2021. Celebrado a través de ZOOM.

-On the limits of ab initio and DFT methods for bioinorganic iron models. Carlos Martín Fernández. KU Leuven. 15/10/2021. Celebrado a través de ZOOM.

-From grains to fragments: the study of polycyclic aromatic hydrocarbons in multiple radiation environments. Amanda L. Steber. Universidad de Valladolid. Celebrado en ZOOM.

-Recent highlights from European XFEL: It is all about the time scale. Robert Feidenhans'l. 24/11/2021. European XFEL. Celebrado en el IMDEA Nanociencia en formato híbrido.

-X-ray transient grating spectroscopy at X-ray free electron lasers. Cristian Svetina. 25/03/2022. Paul Scherrer Institute. Celebrado en el IMDEA Nanociencia en formato híbrido.

Respecto a las acciones de mejoras que se propusieron el curso pasado, una de ellas era ofertar los seminarios en formato híbrido para que así los pudieran seguir desde todas las universidades. Esto se ha hecho, y los participantes han sido de la UAM.

En cuanto al sistema de encuestas, la Universidad Autónoma de Madrid a través de su Escuela de Doctorado realizó encuestas a los doctorandos (una a los de segunda tutela y otra a los que terminaban), directores y al PAS con fecha de 02/06/2022. Se recibieron 2/15 respuestas a la encuesta de los doctorandos intermedia, 2/3 respuestas a la encuesta de los doctorandos final, 14/17 respuestas a la encuesta del PAS y 3/11 respuestas a la encuesta de los directores. Se seguirá trabajando para mejorar la participación en las encuestas ya que en el resto de los nodos no ha resultado ser mejor.

3. Rendimiento académico.

Durante el curso académico se han aprobado un total de 74 tutelas académicas correspondientes a distintos estadios del programa (segunda, tercera, cuarta y quinta tutela).

Asimismo, se han leído un total de 19 tesis: UAM (4), U. Barcelona (4), U. País Vasco (3), Jaume I Castellón (3), U. Valencia (2), UCM (1), U. Oviedo (1), U. Sevilla (1). De ellas, 12 fueron con Mención Internacional y además 6 se

realizaron en cotutela, quedando de manifiesto el carácter internacional del programa. No siempre se cuenta con fondos para poder enviar a los estudiantes a una estancia, pero se exploran distintas vías y, cuando las circunstancias lo permiten, se apuesta por la internacionalización. También es destacable que 17 de las 21 tesis hayan sido calificadas Cum Laude.

Los indicadores también manifiestan que quizás el programa debería fomentar más las colaboraciones con empresas ya que solo 2 de las 21 tesis contaron con la Mención Industrial. El motivo de esto puede residir en el hecho de que la investigación fundamental tiene poca demanda en el mundo empresarial, aunque en los últimos años esta tendencia viene cambiando. Por lo tanto, el programa debería explorar esta posibilidad e identificar posibles áreas que sean de interés para ambas partes.

Por último, hay que comentar que actualmente el programa tiene un total de 99 estudiantes activos. Además, desde el inicio del programa, y hasta la actualidad, se han leído un total de 75 tesis.

4. Abandono.

El doctorado ha tenido dos abandonos ambos de la Universidad de Barcelona. Se trata de los doctorandos Daniil Mnevets y Lluç García los dos de la promoción de ingreso 2019-2020. El primero ha abandonado el doctorado porque su tesis no le motivaba demasiado y prefería dedicarse a otras cosas. El segundo porque inició un programa con doctorado industrial. No ha habido más bajas por el momento.

5. Recursos humanos y materiales.

Los investigadores que participan en el programa, correspondientes a las 13 universidades del consorcio, pueden ser consultados en la página del programa en la sección de líneas de investigación:

<http://www.tccm.es/research-lines/>

Hay 8 líneas de investigación:

- Bioquímica Computacional: 28 investigadores.
- Desarrollo de métodos para la simulación química: 21 investigadores.
- Estados Excitados y fotoquímica: 13 investigadores.
- Estructura molecular y reactividad química: 18 investigadores.
- Estudio de nuevos materiales: 25 investigadores.
- Procesos inducidos por láseres: 8 investigadores.
- Química computacional organometálica: 10 investigadores.
- Superficies y sólidos: 22 investigadores.

Además, cada universidad cuenta con personal de administración y servicios y con soporte para la realización de cálculos teóricos que se sustentan a través de los centros de computación. En el caso de la UAM los cálculos se realizan en el Centro de Computación Científica (CCC). Por último, hay que añadir que en muchos grupos se ha realizado la compra de maquinaria a través de sus proyectos de investigación. Estas son usadas por los doctorandos que participan

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Informe anual de seguimiento Curso 2021-2022

en esas líneas lo que repercute en una mejora en los tiempos de cálculo. Además, a todos los doctorandos se les provee de un puesto de trabajo en el Departamento correspondiente de cada Universidad.

Análisis de los datos derivados de los indicadores

De los indicadores se puede comentar que la cobertura de plazas en la mayoría de las universidades se adecua a la oferta académica. No así en algunas universidades donde las plazas no se han cubierto en los últimos años. La comisión estudiará estos casos para, si es oportuno, adecuar la oferta a la demanda del programa. También se destaca el alto número de tesis que son defendidas. A lo largo del programa de 181 personas inscritas solo 9 han abandonado y lo han hecho por motivos personales (nuevo trabajo, cargas familiares).

Identificación de puntos fuertes

Un análisis del desarrollo del programa y los logros conseguidos han permitido identificar los siguientes puntos fuertes:

- Una excelente formación de los doctores con una amplia movilidad internacional. Un total de 12 tesis han obtenido la Mención Internacional durante el curso académico.
- La calidad de las tesis presentadas, 17 de ellas han obtenido la máxima calificación posible, Cum Laude.

Propuestas de mejora

Propuesta de mejora			
Objetivo	Participación del Workshop del doctorado		
Descripción de la acción de mejora	El curso que viene pretendemos adelantar la fecha del workshop de doctorado para hacerlo coincidir con “Las Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular “esto fomentará la integración de nuestro doctorando con los pertenecientes a otros programas y además les permitirá participar en unas jornadas más amplias orientadas a su colectivo.		
Responsable/s de la ejecución	Comisión Académica/Coordinación de Madrid		
Planificación temporal del desarrollo de la acción			
Inicio	Septiembre de 2022	Duración	Enero de 2023

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Informe anual de seguimiento Curso 2021-2022

Propuesta de mejora			
Objetivo	Homogenización de las páginas web		
Descripción de la acción de mejora	El programa va a trabajar para que la información contenida en las diferentes páginas del programa de cada universidad sea lo más homogénea posible. Se buscará que la información común a todas se encuentre en la página del programa, mientras que la información particular aparezca en la página correspondiente de las instituciones.		
Responsable/s de la ejecución	Comisión Académica/Coordinación de Madrid		
Planificación temporal del desarrollo de la acción			
Inicio	Octubre 2022	Duración	Junio 2023

Propuesta de mejora			
Objetivo	Mejorar la participación de las encuestas		
Descripción de la acción de mejora	El programa va a trabajar para mejorar la participación de las encuestas tanto a nivel local como con el resto de las universidades. Este trabajo lo realizará en conjunto con la EDUAM.		
Responsable/s de la ejecución	Comisión Académica/Coordinación de Madrid /EDUAM		
Planificación temporal del desarrollo de la acción			
Inicio	Octubre 2022	Duración	Julio 2023

Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

Informe anual de seguimiento Curso 2021-2022

Propuesta de mejora			
Objetivo	Seguimiento de los datos de matrícula en cada una de las universidades participantes en el programa		
Descripción de la acción de mejora	Antes del periodo de solicitud de admisión de cada universidad, se realizará una campaña de divulgación del programa de doctorado para atraer candidata/os. El Coordinador de la universidad coordinadora recopilará la información de demanda y matrícula a través de las subcomisiones académicas de cada universidad para evaluar esos datos y proponer las acciones que considere adecuadas.		
Responsable/s de la ejecución	Comisión Académica/Coordinación de Madrid		
Planificación temporal del desarrollo de la acción			
Inicio	Octubre 2023	Duración	Febrero 2024

Documentación de referencia

- Encuestas realizadas en la UAM.
- Indicadores enviados por la EDUAM, y por el resto de las universidades participantes en el PD.