



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Química

Autoinforme d'Accreditació

Màster Interuniversitari en
Modelització Computacional Atomística i
Multiescala en Física, Química i Bioquímica

Facultat de Química

Juny 2019

Índex

0. Dades identificadores	3
1. Presentació del centre	4
2. Relació amb els processos VSMA	6
3. Valoració de l'assoliment dels estàndards	11
Estàndard 1. Qualitat del programa formatiu	11
Estàndard 2: Pertinència de la informació pública	16
2.1. La institució publica informació veraç, completa, actualitzada i accessible sobre les característiques de la titulació i el seu desenvolupament operatiu	16
2.2. La institució publica informació sobre els resultats acadèmics i de satisfacció.....	17
2.3. La institució publica el SGIQ en què s'emmarca la titulació i els resultats del seguiment i l'acreditació de la titulació	17
Estàndard 3. Eficàcia del sistema de garantia interna de la qualitat (SAIQU/SGIQ) dels ensenyaments de la Facultat de Química	18
3.1 Que el SGIQ implementat té processos que garanteixin el disseny, l'aprovació, el seguiment i l'acreditació de les titulacions.	18
3.2 Que el SGIQ implementat garanteix la recollida d'informació i dels resultats rellevants per a la gestió eficient de les titulacions, en especial els resultats acadèmics i la satisfacció dels grups d'interès.	19
Estàndard 4: Adequació del professorat al programa formatiu	21
Estàndard 5: Eficàcia dels sistemes de suport a l'aprenentatge	28
Estàndard 6: Qualitat dels resultats dels programes formatius	35
4. Valoració i proposta de Pla de Millores	47
5. Evidències	53

0. Dades identificadores

Aquest document recull l'autoinforme d'acreditació del màster interuniversitari en Modelització Computacional atòmica i Multiescala en Física, Química i Bioquímica que imparteixen conjuntament la Universitat Politècnica de Catalunya i la Universitat de Barcelona, sent aquesta la coordinadora. Es descriuen en les taules següents les dades identificadores del màster que es presenta al procés d'acreditació.

Universitat	Universitat de Barcelona
Nom del centre	Facultat de Química
Dades de contacte	Martí i Franquès, 1-11 08028 Barcelona Horari de secretaria: matins de dilluns a divendres de 8:00 a 14:00h. e-mail: secretaria.quimica@ub.edu telèfons: 934 021 200 934 021 201

Responsables d'elaborar l'autoinforme	Dr. Ibério de P. Ribeiro Moreira (Coordinador del Màster) Comissió Coordinadora del Màster
Responsables de revisar l'autoinforme	Dr. Ibério de P. Ribeiro Moreira (Coordinador del Màster) Comissió Permanent de la Comissió de Qualitat (Director de la Comissió de Qualitat; Degà; Vicedegà d'ordenació acadèmica i qualitat de la Facultat de Química; Tècnic UQMAS) (+ revisions procedents de l'exposició pública)
Responsables d'aprovar l'autoinforme	Comissió de Qualitat
Data d'aprovació	1 de juliol de 2019

Taula 0.1 Titulació impartida al centre que es presenta al procés d'acreditació

Titulació	Codi RUCT	Crèdits ECTS	Tipologia	Any d'implantació	Responsable de la titulació
MU en Modelització Computacional Atòmica i Multiescala en Física, Química i Bioquímica	4314736	60	Interuniversitari coordinat	2015	Dr. Ibério de P. Ribeiro Moreira

1. Presentació del centre

La Facultat de Química proposa una oferta d'ensenyaments oficials que es concreta en titulacions de grau, de màster universitari i de doctorat. A més a més, conscient de la importància de l'aprenentatge al llarg de la vida, ofereix cursos de formació continuada, com ara cursos d'extensió universitària.

A més de l'activitat docent, al centre es realitza una intensa activitat investigadora (com s'evidencia a les [dades de recerca](#) recollides per l'aplicatiu GREC) participant en àrees d'elevada competitivitat en estreta cooperació amb sectors públics i privats relacionats amb les tecnologies químiques. Aquest fet es considera molt positiu ja que permet que el professorat del centre estigui en constant reciclatge en relació als avenços de la disciplina.

Pel que fa a la posició del centre en els rànquings i en el marc institucional de la universitat de Barcelona, la Facultat de Química s'ha situat de forma històrica en posicions de prestigi. En aquest sentit i per a citar uns exemples, la Facultat de Química, integrada en la Universitat de Barcelona continua en l'actualitat situant-se com la millor de l'Estat Espanyol mentre que a nivell internacional es posiciona entre les 200 millors del món en l'àmbit de la Química segons l'Academic Ranking of World Universities (ARWU-2018, posició 151-200) i entre les 100 millors segons el rànquing QS World Universities (QS World University Ranking by Subject 2018, posició 51-100). D'altra banda, la Facultat de Química és el centre de docència i recerca en química més ben valorat de tot l'Estat i un centre de recerca capdavanter en aspectes molt diversos de la química bàsica i aplicada, esdevenint fins i tot el millor centre per a estudiar Química segons el diari El Mundo.

Aquestes dades permeten constatar que la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona acumula una llarga tradició històrica i, alhora, és un centre modern i innovador en docència, recerca i transferència de coneixement.

Oferta docent de la Facultat

L'oferta docent es pot consultar al web del centre a la pestanya [Estudis](#), on apareixen les titulacions d'[oferta d'estudis de grau](#) i d'[oferta de màsters, postgraus i doctorat](#). A la **Taula 1.1** es presenten les dades generals dels ensenyaments de grau i màster que s'imparteixen a la Facultat de Química de la UB. A més de les titulacions de grau i màster que es coordinen des de la Facultat de Química de la UB, la facultat també participa en diferents màsters interuniversitaris, destacant la participació en dos màsters del programa *Erasmus Mundus*, un dels quals és coordinat pel centre. També participa en cinc programes de doctorat que han estat verificats recentment d'acord a la nova ordenació dels ensenyaments universitaris oficials (Reial Decret 99/2011, de 28 de gener) que estableix el marc normatiu que regula els ensenyaments oficials de doctorat. En aquests ensenyaments s'ofereixen més de 340 places de grau i unes 170 de màster, hi ha actualment uns 1530 matriculats de graus, gairebé 200 alumnes matriculats de màster i més de 70 doctorands realitzant la seva tesi. Cada curs completen aquests estudis un 230 alumnes dels estudis de grau i 140 de màster i involucren més de 300 professors. Aquests valors demostren la rellevància de la Facultat de Química, tant dins de la UB com a nivell català com a nivell estatal.

Taula 1.1 Titulacions impartides al centre.

Titulació	Codi RUCT	Crèdits ECTS	Tipologia	Any d'implantació	Responsable de la titulació
Grau en Enginyeria de Materials	2500298	240		2010	Núria Llorca Isern
Grau en Enginyeria Química	2500484	240		2009	Esther Chamarro Aguilera
Grau de Química	2500505	240		2009	Ramon Reigada Sanz
MU en Enginyeria Ambiental	4313257	60		2012	Joan Dosta Parras
MU de Química Analítica	4313251	60		2012	Jose Francisco García Martínez
MU de Química de Materials Aplicada	4313255	60		2012	Gabriel Aullón López
MU de Química Orgànica	4313254	60		2012	Javier Ariza Piquer
MU en Enginyeria Química	4313877	90		2013	Javier Tejero Salvador
MU de Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica	4314736	60	Interuniversitari coordinat	2015	Ibério de P. Ribeiro Moreira

2. Relació amb els processos VSMA

Com s'ha esmentat anteriorment, a la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona s'imparteixen tres titulacions de grau i sis de màster. A la Taula 2.1 es recullen les dades més rellevants titulacions en relació al cicle de vida de les titulacions al marc VSMA.

Taula 2.1. Recull de les dades més rellevants titulacions en relació al cicle de vida de les titulacions al marc VSMA

Titulació	Codi RUCT	Crèdits ECTS	Data de verificació	Data d'acreditació	Data de modificació	Situació VSMA
Grau en Enginyeria de Materials	2500298	240	01/04/2009	15/12/2016	26/07/2018	Seguiment post acreditació
Grau en Enginyeria Química	2500484	240	13/05/2009	15/12/2016	07/06/2018	Seguiment post acreditació
Grau de Química	2500505	240	03/03/2009	15/12/2016	30/07/2018	Seguiment post acreditació
MU en Enginyeria Ambiental	4313257	60	01/06/2012	15/12/2016	No aplica	Seguiment post acreditació
MU en Enginyeria Química	4313877	90	23/07/2013	15/12/2016	No aplica	Seguiment post acreditació
MU de Química Analítica	4313251	60	19/09/2012	15/12/2016	Pendent de tramitació	Seguiment post acreditació
MU de Química de Materials Aplicada	4313255	60	19/09/2012	15/12/2016	No aplica	Seguiment post acreditació
MU de Química Orgànica	4313254	60	19/09/2012	15/12/2016	No aplica	Seguiment post acreditació
MU en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica	4314736	60	14/12/2015	No aplica	Pendent de tramitació	En procés d'acreditació

Amb l'excepció del "Màster Universitari de Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica", que ha de rebre la visita externa dins el procés d'acreditació l'any 2019, totes aquestes titulacions han rebut el segell d'acreditació bé "favorable" o bé "d'excel·lència" per part de l'Agència per a la Qualitat del Sistema Universitari de Catalunya ([Informe dels resultats d'acreditació](#)).

El Màster Universitari de Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica es troba en procés d'acreditació, amb visita externa prevista per la tardor de 2019. Com a part d'aquest procés s'han introduït una sèrie de modificacions a la memòria del títol per incloure els requeriments de millora que s'inclouen a [l'informe de verificació AQU del Màster Universitari de Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica](#) del 20 d'octubre de 2015 que indicaven les següents propostes de millora:

- Actualizar la denominación del título del máster en el convenio entre ambas Universidades.
- Aportar referencias concretas de las salidas previstas para los estudiantes en el ámbito socioeconómico e investigador del entorno e informar sobre la demanda prevista de egresados en dichos ámbitos basada en datos cuantitativos y experiencias previas.
- Mejorar la redacción de las competencias específicas evitando el uso del verbo comprender.

Per donar resposta a aquestes propostes de millora s'han fet els canvis oportuns a la memòria del títol en el període habilitat per introduir-les a l'aplicatiu SEDE. A la **Taula 2.2** s'inclou un resum de les modificacions que s'han fet, en la qual es destaquen en negreta les modificacions que responen a les propostes de millora que s'indiquen en l'informe de verificació del títol. També s'ha aprofitat per incloure altres modificacions i correccions menors incloses a [l'informe de seguiment del centre del 2018](#) que no impliquen canvis substancials de la memòria de verificació del títol. Els canvis introduïts en la memòria verificada del títol permeten ajustar alguns aspectes a les característiques reals que s'han pogut implementar, tenint en compte les condicions de contorn. En aquest sentit, s'han ajustat el nombre de places ofertes a la demanda real (25 places), s'ha introduït la nova assignatura de Modelització de Nanomaterials i Superfícies (implementada i ofertada aquest curs 2018-19) i s'han perfilat millor les possibles sortides que ofereix el màster tenint en compte algunes informacions dels egressats.

Taula 2.2. Resum de les modificacions introduïdes a la memòria del títol.

Código	Descripción de la modificación
1.1 - Datos básicos de la descripción del título	<i>Se ha modificado el documento pdf con el convenio de colaboración interuniversitaria entre la Universidad de Barcelona y la Universidad Politécnica de Catalunya para la realización conjunta del título incluyendo la adenda que modifica la denominación del título.</i>
2.1 - Justificación, adecuación de la propuesta y procedimientos	<i>El texto del documento anexo en este apartado se ha modificado para dar respuesta a la propuesta de mejora indicada en el informe de verificación, con los cambios introducidos marcados en azul. Esta propuesta de mejora solicita a la institución que aporte referencias concretas de las salidas previstas para los estudiantes en el ámbito socioeconómico e investigador del entorno y que informe sobre la demanda prevista de egresados en dichos ámbitos, basada en datos cuantitativos y experiencias previas. Aunque no se dispone de estos datos cuantitativos relativos a los dos títulos de máster que se indican como experiencias previas (Máster en Química Teórica y Computacional y máster en Física Computacional), se han indicado algunos datos basados en entrevistas con algunos estudiantes que habían cursado estos estudios que nos permiten justificar los argumentos que se dan en la respuesta a esta propuesta de mejora. Cabe destacar en este sentido que la Facultad de Química de la Universidad de Barcelona está implementando un sistema de seguimiento de los estudiantes de máster para disponer de ese tipo de información en el futuro. Esto queda recogido en el plan de mejoras que se ha incluido en el informe de seguimiento de las titulaciones que se imparten en este de centro que se ha enviado recientemente. Por otro lado, la información relativa a los egresados de los tres cursos que ya se han impartido permite reforzar los argumentos presentados ya que el 100% de los titulados del curso 2015-16 están haciendo actualmente el doctorado con una beca o contrato de investigación, un 70% de los titulados del curso 2016-17 han iniciado los estudios de doctorado y de los titulados del curso 2017-18, un 60%. Todos ellos están desarrollando su investigación en ámbitos relacionados con la temática del máster. Por último, estudiantes de este máster que han accedido al mercado laboral nos han confirmado que los perfiles con una formación científica interdisciplinar que además tengan conocimientos avanzados en informática, programación y gestión de información son muy valorados por su versatilidad en el uso de aplicaciones informáticas de gestión, control y análisis de datos ("big data") en departamentos de I+D+i de empresas tecnológicas, de consultoría y auditoría con las que han contactado.</i>

3.2 - Competencias transversales	Se han corregido dos errores tipográficos en el redactado de las competencias CT5 y CG6.
3.3 - Competencias específicas	<i>Se ha modificado el redactado de las competencias específicas para incluir la propuesta de mejora que se indica en el informe de verificación del título, evitando el uso del verbo comprender. También se han corregido algunos errores tipográficos en las competencias CE1, CE9 y CE19.</i>
4.1 - Sistemas de información previo	Se han actualizado algunas direcciones web que se han modificado recientemente.
4.2 - Requisitos de acceso y criterios de admisión	Se han corregido algunos errores tipográficos.
4.3 - Apoyo a estudiantes	Se ha revisado el texto relativo a la descripción del plan de acción tutorial (PAT) del máster, actualizando algunas direcciones web que se han modificado recientemente.
4.4 - Sistemas de transferencia y reconocimiento de créditos	Siguiendo las indicaciones del Vicerrectorado de Docencia y Ordenación Académica de la Universidad de Barcelona, se ha indicado la normativa completa sobre transferencia y reconocimiento de créditos y los criterios del máster para el reconocimiento de la experiencia laboral.
5.1 - Descripción del plan de estudios	Se ha substituido la asignatura optativa de Superficies y Catálisis por una nueva asignatura de Modelización de Nanomateriales y Superficies en la materia Materiales, tal y como se indica en los informes de seguimiento. Esta modificación afecta el texto de los subapartados 5.5.1.1, 5.5.1.1.1, 5.5.1.1.2 y 5.5.1.1.3.
1.3 - Universidades y centros en los que se imparte	Se ha ajustado el número de plazas ofertadas al valor actual de 25 alumnos, que se propuso en el plan de mejoras del último informe de seguimiento de los títulos que se imparten en la Facultad de Química de la Universidad de Barcelona (centro coordinador de este título).
6.1 - Profesorado	Fruto del proceso de seguimiento de la titulación y documentado en los informes de seguimiento se ha actualizado la sección 6.1.
5.5 - Módulos, Materias y/o Asignaturas	Se ha corregido la planificación de la asignatura de Métodos Matemáticos Aplicados, que debe programarse durante el primer semestre del curso 1. También se ha corregido un error tipográfico detectado.

Procés d'elaboració de l'informe

L'elaboració d'aquest autoinforme ha estat a càrrec de la Comissió de Coordinació del Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica amb juntament amb la comissió permanent de la Comissió de Qualitat del centre.

La Comissió de Coordinació del Màster la formen professors de la UB i la UPC que també participen en la docència del màster interuniversitari. La composició de la Comissió de Coordinació del màster té en compte aquesta estructura interuniversitària i actualment consta de tres professors del Departament de Ciència de Materials i Química Física de la UB (Dr. Francesc Mas Pujadas, Dr. Jordi Ribas Ariño, Dr. Sergio Madurga Díez), dos professors del Departament de Física de la Matèria Condensada de la UB (Dr. David Reguera López, Dr. Giancarlo Franzese), un professor del Departament de Física de la UPC (Dra. Elvira Guàrdia Manuel), un professor del Departament d'Enginyeria Química de la UPC (Dr. Joan Torras Costa) i el coordinador, que també és professor del Departament de Ciència de Materials i Química Física de la UB. Aquests professors formen part dels departaments que aporten el gruix del professorat del màster i fan de contacte amb els departaments als que pertanyen per resoldre aspectes de gestió i coordinació que els afectin.

El coordinador del Màster ha organitzat les tasques de recollida de dades i ha elaborat la part corresponent a l'ensenyament del que és responsable, amb l'ajut de la resta de membres de la Comissió de Coordinació del Màster. Per portar a terme aquesta tasca s'han inclòs en l'ordre del dia de les diferents reunions de la Comissió de Coordinació fetes durant aquest curs la discussió dels temes relatius a l'acreditació, amb l'assignació de les tasques per anar completant-lo. Aquestes reunions s'han dut a terme majoritàriament durant els mesos d'abril, maig i juny d'enguany.

La comissió permanent de la Comissió de Qualitat del Centre (Director de la CQ; Degà; VD; Tècnic UQMAS) han elaborat els apartats de responsabilitat del centre i han revisat tot el document, fent una revisió de la versió que s'ha sotmès a exposició pública.

La versió final del document inclou les propostes de modificació que provenen dels comentaris que han fet alguns membres de les comissions de Coordinació del Màster i de la permanent de la Comissió de Qualitat sobre la versió sotmesa a exposició pública. Finalment, aquest document ha estat aprovat en primera instància per la Comissió de Qualitat.

3. Valoració de l'assoliment dels estàndards

En aquest apartat es presenten i valoren les evidències que mostren l'assoliment de cadascun dels sis estàndards en que es sustenta els processos VSMA. Pels estàndards 2 i 3 s'ha fet una valoració a escala de centre, mentre que en el cas dels estàndards 1, 4, 5 i 6 la valoració és mixta, tant a escala de centre com d'ensenyament.

Estàndard 1. Qualitat del programa formatiu

«El disseny de la titulació (perfil de competències i estructura del currículum) està actualitzat segons els requisits de la disciplina.»

Preàmbul

Aquest informe de seguiment contempla el Màster Universitari en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica, que ha de rebre la visita externa dins el procés d'acreditació l'any 2019. En vista d'aquest procediment, s'han introduït les modificacions en la memòria del títol en l'aplicatiu RUCT d'acord amb els requeriments indicats en l'informe de verificació i altres que han sorgit en el procés de millora indicat en el pla de millores. Aquests canvis no són substancials i s'han descrit a la **Taula 2.2**.

1.1 El perfil de competències de la titulació és consistent amb els requisits de la disciplina i amb el nivell formatiu corresponent del MECES

Donat que tots els ensenyaments del centre es van verificar quan ja s'havia aprovat el MECES i atès que la titulació objecte d'aquest informe de seguiment no ha estat objecte de modificació substancial en el seu perfil competencial d'ençà de la seva verificació, es considera que els resultats d'aprenentatge i el perfil competencial del Màster Universitari en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica és consistent amb els requisits de les seves disciplines i amb el nivell formatiu corresponent del MECES a data d'elaboració d'aquest informe.

1.2 El pla d'estudis i l'estructura del currículum són coherents amb el perfil de competències i amb els objectius de la titulació

De manera anàloga a com s'ha esmentat en el subestàndard anterior, els informes finals d'avaluació de verificació de la titulació destaca l'elevada coherència del pla d'estudis amb el perfil competencial i els objectius de la titulació. Donat que no s'ha realitzat cap modificació substancial en relació a la memòria verificada del Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica pel que fa al pla d'estudis ni la seva estructura ecurricular, es considera que la memòria modificada dona una resposta satisfactòria al subestàndard. Resulta oportú destacar les accions per a la revisió i millora continuada dels plans docents de les assignatures, contemplades en el SAIQU del centre i que permès optimitzar la coherència entre el pla d'estudis, l'estructura del currículum, el resultat d'aprenentatge i els objectius de cada titulació. Tal i com s'ha descrit a l'apartat 2, no s'ha realitzat cap modificació substancial en relació a la memòria verificada, si bé s'han fet en pocs casos petits ajustos a l'itinerari curricular com ara variar l'ordre d'impartició d'alguna assignatura. En aquest sentit, una millora significativa que no obliga a modificar la memòria del

títol s'ha implementat aquest curs 2018-19 motivada pel fet que una de les assignatures optatives del màster ("Superfícies i Catàlisi") no ha tingut cap alumne matriculat durant tres cursos consecutius. S'ha acordat no seguir ofertant aquesta assignatura i proposar una de nova ("Modelització de Nanomaterials i Superfícies") que cobreix els objectius formatius i les competències que es pretenien desenvolupar amb l'assignatura optativa anterior, tanmateix mantenint un enfoc més general i que ha tingut una acceptació millor que l'assignatura que substitueix (s'ha pogut oferir aquest curs amb 4 alumnes matriculats).

1.3 Els estudiants admesos tenen el perfil d'ingrés adequat per a la titulació i el seu nombre és coherent amb el nombre de places ofertes

En els tres cursos d'ençà que es va posar en marxa el títol tots els estudiants matriculats han tingut un dels perfils que donen accés directe al màster: Grau en Física (2015(3); 2016(5), 2017(5)), Grau en Química (2015(2); 2016(5), 2017(6)), Grau en Bioquímica (2016(1), 2017(1)), Enginyeria Física(2015(1)), Enginyeria Química (2016 (1)), Grau doble en Física i Química (2017(1)). En aquest sentit cal remarcar que cap dels estudiants inscrits fins ara no necessitaria fer complements formatius en vista de la seva titulació d'origen. Els criteris d'admissió i la documentació necessària a presentar per tal de ser avaluada per la Comissió Coordinadora del màster, estan clarament especificats a la pàgina web de l'ensenyament. La comissió Coordinadora del Màster analitza els currículums dels alumnes inscrits i intenta ajustar-se al màxim als perfils que donen accés directe per assegurar l'aprofitament dels estudis per part dels alumnes admesos. En els casos dubtosos s'han fet algunes entrevistes per decidir si convenia acceptar o no l'estudiant. En el cas dels alumnes procedents de l'estranger s'han fet entrevistes per aclarir el nivell formatiu assolit en les assignatures de matemàtiques, física, química i programació indicades en el seu expedient acadèmic. L'objectiu d'aquesta selecció és evitar una diversitat excessiva en el nivell formatiu dels alumnes en la mateixa aula. En tots els casos s'ha exigint com a requisit per poder matricular-se del màster que tots els alumnes hagin d'acreditat un nivell d'anglès mínim equivalent al B1 del Marc europeu comú de referència.

A la **Taula 3.1** es recullen, per a cada curs i des de l'any en que es va començar a impartir l'ensenyament, les dades referides a l'oferta de places, el nombre d'estudiants de nou accés, nombre total d'estudiants matriculats i el nombre d'estudiants graduats. També s'han inclòs els valors de l'indicador de demanda total (determinat com el percentatge de sol·licituds de preinscripció respecte el nombre de places ofertes) i el nombre d'estudiants de nou ingrés provinents d'altres universitats, per tal de valorar l'adequació del nombre de places ofertes.

El nombre d'estudiants que accedeixen al màster presenta una evolució positiva des de la seva implantació. S'observa una tendència cap a la consolidació de l'ensenyament, si bé destaca la baixa matriculació en el curs d'implantació. En aquest cas s'ha de tenir en compte el fet que l'informe d'avaluació va arribar a l'octubre i va obligar a endarrerir tot el procediment de matrícula, fet que va desanimar un nombre considerable d'inscrits que no van formalitzar la matrícula. Fruit d'aquesta reflexió i a partir de l'informe de seguiment realitzat pel bienni 2015-2017, es va incorporar com a acció del Pla de Millores la reducció de l'oferta de places de la titulació (MMC-130-E13-17-01) fins a 25 per ajustar la relació entre oferta i demanda. Aquest canvi s'ha implantat aquest curs 2018-19 i es preveu mantenir-lo durant els propers cursos.

Taula 3.1. Dades generals de l'ensenyament en relació a l'oferta de places.

	2015-16	2016-17	2017-18	2018-19
Places que s'ofereixen	30	30	30	25

Nombre d'estudiants de nou accés	6	11+1 ²	16	16
Nombre d'estudiants de nou accés d'altres universitats ¹	1	2+1 ²	2	8
Nombre total d'estudiants matriculats	6	11+1 ²	16	19
Nombre de graduats	6	11+1 ²	12	n.d.
Demanda total de l'ensenyament (%)	63	57	110	100

¹No provinents de la UB ni la UPC. ²Estudiant del programa ERASMUS. Font: VSMA (cursos 15-16 i 16-17) i centre (cursos 17-18 i 18-19).

Un altre aspecte destacable és la matriculació d'alumnes provinents d'altres universitats, majoritàriament de l'estat espanyol, el que indicaria que l'interès per aquesta titulació va més enllà de l'àmbit català. Destaquem el fet que la situació socio-política viscuda durant l'any 2017 va provocar, directa o indirectament, que determinats alumnes que havien mostrat disposició per incorporar-se al màster, alguns d'ells admesos i participants de les reunions informatives de prematrícula, decidissin cursar altres màsters computacionals fora del sistema universitari català. Tot i aquest descens puntual, aquest curs 2018-19 tonem a recuperar la tendència i s'han matriculat 3 estudiants que han cursat els estudis al País Basc (2) i Galícia (1). Cal esmentar, per últim, que durant el curs 2015-16 s'han admès 4 alumnes procedents d'altres màsters que han cursat 2 assignatures optatives (6 ECTS) cadascun; durant el curs 2016-17, 1 alumne ERASMUS va fer tot el màster (60 ECTS) per convalidar-los pel segon curs d'un màster de 180 ECTS que estava cursant; 1 alumne ERASMUS+ que va cursar 5 assignatures optatives (15 ECTS) i un treball tutelat de 12 ECTS.

Taula 3.2. Procedència dels estudiants matriculats del màster.

	2015-16	2016-17	2017-18	2018-19
Estudiants que provenen de la mateixa universitat	4	9	15	11
Estudiants que provenen d'altres universitats del SUC	1	0	1	5
Estudiants que provenen d'altres universitats de l'Estat	1	2	0	3
Estudiants que provenen d'universitats estrangeres	0	1 ¹	0	0

¹Estudiant del programa ERASMUS. Unitat proveïdora: Planificació Acadèmicodocent, Elaboració: APQUB

1.4 La titulació disposa de mecanismes de coordinació docent adequats

La Facultat de Química de la UB disposa de sistemes de coordinació institucionals establerts segon el que es disposa a l'Estatut de la UB. En aquest apartat només es fa referència als mecanismes de coordinació acadèmica i docent, tant per al conjunt de la Facultat com per a cadascuna de les titulacions. Aquests mecanismes tenen com a objectiu incrementar l'eficàcia i assegurar la qualitat de l'acció docent. Els òrgans de coordinació de la facultat són: la Junta de Facultat, la Comissió Acadèmica de Centre (CAC), el Consell d'Estudis o la Comissió

Coordinadora del Màster segons s'escaigui, i el Consell de departament. La Comissió Acadèmica de Centre és una comissió delegada de la Junta de Facultat. La seva composició ve determinada pel reglament de la Facultat. S'ocupa de la coordinació entre els diferents ensenyaments i de resoldre els afers de tràmit de caràcter acadèmic. Per temes de rellevància pel centre, com l'aprovació de noves propostes de titulacions, actua generalment, com a comissió consultiva que informa a la Junta de Facultat

Els Consells d'Estudis (CEs) o Comissions Coordinadores de Màster (CCMs) permeten desplegar les accions de les titulacions. Entre les seves funcions hi ha l'encàrrec de la docència als diferents departaments implicats en el grau. El Consell de Departament té la responsabilitat d'elaborar i aprovar el pla docent de cada assignatura i aprovar l'assignació del professorat (equip docent). El departament també nomena un coordinador de l'equip docent per tal de consensuar i aprovar un pla docent únic per a cada assignatura. El pla docent de cada assignatura, s'elabora segons la [normativa reguladora dels plans docents de les assignatures i de l'avaluació i la qualificació dels aprenentatges de la ub](#), i contempla els diferents aspectes de l'assignatura que inclouen els continguts, la metodologia docent, els sistemes d'avaluació i els recursos bibliogràfics. La publicació conjunta al juliol del pla docent i dels professors encarregats de la docència permet que els estudiants en tinguin un coneixement directe en el moment de la matriculació, que és durant el mes de setembre, i aleshores puguin fer l'elecció de grup-horari. A més el coordinador docent de l'assignatura es reuneix periòdicament amb els professors que formen l'equip docent per la coordinació del desenvolupament de l'assignatura.

La Comissió de Coordinació del Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica la formen professors de la UB i la UPC que també participen en la docència del màster interuniversitari. La composició de la Comissió de Coordinació del màster té en compte aquesta estructura interuniversitària i actualment consta de tres professors del Departament de Ciència de Materials i Química Física de la UB, dos professors del Departament de Física de la Matèria Condensada de la UB, un professor del Departament de Física de la UPC, un professor del Departament d'Enginyeria Química de la UPC i el coordinador, que també és professor del Departament de Ciència de Materials i Química Física de la UB. Aquests professors formen part dels departaments que aporten el gruix del professorat del màster i fan de contacte amb els departaments als que pertanyen per resoldre aspectes de gestió i coordinació que els afectin. La Comissió de Coordinació analitza les necessitats docents de cada curs i nomena un coordinador docent d'entre el professorat al que cada departament ha fet l'encàrrec d'una assignatura. Fins ara, s'assigna aquest rol de coordinador a un professor de la UB per agilitzar la gestió de les actes, campus virtual de les assignatures, etc. que han de ser les del centre coordinador. A més de les tasques descrites en la part general d'aquest epígraf, el coordinador docent també està en contacte periòdic amb el Coordinador de Màster per solucionar els aspectes de funcionament del dia a dia. Aquesta coordinació ha propiciat la introducció de millores en el desenvolupament dels ensenyaments (redistribució de continguts d'assignatures de la mateixa matèria, millor adequació de la programació de les assignatures, etc.) tal i com es recull a les accions de millora que es detallen als informes de seguiment.

1.5 L'aplicació de les diferents normatives es realitza de manera adequada i té un impacte positiu sobre els resultats de la titulació

A la Facultat de Química són d'aplicació les normatives acadèmiques bàsiques que són pròpies de la Universitat de Barcelona i que són aprovades a la Comissió Acadèmica de Consell de Govern. Enllaç a la [normativa acadèmica de la Universitat de Barcelona](#).

La Universitat de Barcelona va establir un marc normatiu amb les directrius generals relatives als treballs finals de grau i màster, definint les bases comunes que garanteixen una actuació homogènia i coherent a la UB. Els centres van desenvolupar aquesta normativa marc detallant l'organització en el centre o en cadascuna de les seves titulacions. Així la Facultat de Química ha desenvolupat sengles normatives reguladores del treball de fi de màster i el treball de fi de grau.

Aquestes normatives han assegurat un funcionament correcte dels processos que regulen i han permès resoldre les dificultats que han sorgit de manera ràpida i sense complicacions. A data d'avui totes les incidències relatives a l'aplicació d'aquestes normatives s'han pogut resoldre a nivell de centre i es considera que s'han aplicat de manera adequada i que han tingut efectes positius en els resultats de les titulacions ja que ajuden a regular el pas dels estudiants pels diferents ensenyaments i creen un marc que facilita una acció docent coordinada a diferents nivells.

Estàndard 2: Pertinència de la informació pública

«La institució informa de manera adequada tots els grups d'interès sobre les característiques del programa i sobre els processos de gestió que en garanteixen la qualitat. »

Preàmbul

Des del darrer procés d'acreditació, el web de la Facultat de Química s'ha modificat substancialment pel que fa d'una banda al format, el qual està ara basat en el sistema de gestió de continguts web, i de l'altra a l'estructura, la qual es fonamenta en els requisits establerts per la universitat i que permeten una personalització en alguns aspectes segons cada centre. Cal afegir també que de cara a garantir una major operativitat en l'actualització dels continguts la Facultat ha creat la figura de la persona Responsable de l'estratègia comunicativa i, d'altra banda, una figura més tècnica concretada en el Responsable dels continguts de la pàgina web.

Així, el web s'estructura de manera ben diferenciada per distribuir les informacions adreçades als diferents col·lectius. En primer lloc, a la part superior es disposa d'una barra de pestanyes amb l'accés a les grans seccions en les què es divideix el web: La Facultat, Estudis, Recerca, Serveis i Relacions Externes. D'altra banda, a la part esquerra trobem aquella informació habitualment més cercada, ordenada segons un sistema de dreceres i agrupada segons el col·lectiu d'estudiants o els col·lectius del personal docent i investigador i el personal d'administració i serveis. A la dreta s'hi troben els enllaços a la informació referent a l'oferta formativa, els portals d'accés a les intranets dels diferents col·lectius així com també un conjunt de baners o botons d'accés directe a informacions essencials de la facultat com ara els departaments, el pla d'autoprotecció, la borsa de treball i les pràctiques externes i l'actualitat i comunicació. als col·lectius interns: estudiants. Finalment, la part central es dedica a les notícies i al tauler d'anuncis mentre que a la part inferior s'hi troba l'adreça i dades de contacte generals del centre i l'accés als aplicatius de les bústies de dubtes i consultes i de queixes i reclamacions.

2.1. La institució publica informació veraç, completa, actualitzada i accessible sobre les característiques de la titulació i el seu desenvolupament operatiu

A la renovada pàgina principal del web de la facultat hi ha enllaços directes a l'Oferta d'estudis de Graus i Màsters Universitaris, els quals són també accessibles a través de la [secció Estudis](#), des d'on es pot accedir als webs propis de cadascun dels ensenyaments. Un cop s'hi accedeix es mostra informació general de l'ensenyament i, des del menú de la dreta, es pot accedir als diferents apartats, els quals inclouen els objectius i les competències assolides de la titulació, l'Accés i l'admissió, el pla d'estudis, les Pràctiques Externes, la metodologia docent i el sistema d'avaluació, les sortides professionals, els mecanismes de suport o orientació, la matrícula, el calendari, horaris, aules i avaluació, un apartat des d'on s'accedeix a la guia acadèmica, els plans docents i les dades de l'ensenyament. La presentació de l'ensenyament, situada com el primer dels elements del menú, consta d'una breu descripció del títol i la relació de dades característiques bàsiques del grau incloent el responsable de l'ensenyament. Finalment, a la dreta de la pàgina web de l'ensenyament es mostra un menú amb els principals accessos directes relacionats amb les intranets i altres informacions rellevants.

Cal destacar també que existeixen propostes de millora derivades de l'últim informe d'acreditació i de l'informe de revisió del sistema que han estat incorporades al pla de millores com ara la dotació de major visibilitat a la informació pública sobre la oferta i els criteris d'admissió dels TFM (MMC-140-E21-19-01). A més a més cal citar també que en el marc de revisió del mapa de processos i el conjunt de PEQ del SAIQU s'està revisant el PEQ 140 per adaptar-lo a la realitat existent i als requeriments d'aquesta dimensió.

Els següent enllaç dirigeix al web oficial del màster que descriu tota la informació rellevant de matrícula, professorat, horaris, plans docents, etc. que s'actualitza durant els mesos de juny i juliol:

[Màster de Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica](#)

El SAIQU de la Facultat introdueix els mecanismes per assegurar que la informació disponible sigui correcta i que s'actualitza amb la freqüència adequada. A tal efecte a tots els apartats del web s'indica la data de la darrera actualització. Atesa la complexitat que implica el manteniment del lloc web de la Facultat, el deganat ha designat una persona responsable de [l'estratègia comunicativa](#) i una altra responsable dels continguts de la pàgina web, els quals s'encarreguen del manteniment i actualització de la informació pública de la Facultat.

2.2. La institució publica informació sobre els resultats acadèmics i de satisfacció.

En l'apartat *Dades de l'ensenyament* de cada titulació s'accedeix a un resum de les principals dades de la titulació i dels indicadors de resultats. D'altra banda, al final d'aquest resum introductor i també des de la secció "*Sistema de Qualitat- SAIQU*" (vegeu apartat 2.3) es pot enllaçar al repositori de dades, indicadors i enquestes de l'ensenyament [Espai VSMA](#) promogut i actualitzat per l'Agència de Polítiques i de Qualitat de la UB i on s'hi troba també un enllaç a les enquestes del Gabinet Tècnic del Rectorat. A més a més des de la Facultat es fa difusió també d'un resum de les dades de satisfacció més rellevants tal i com es descriu en el PEQ 140.

2.3. La institució publica el SGIQ en què s'emmarca la titulació i els resultats del seguiment i l'acreditació de la titulació

El centre presenta i difon la informació relativa a la qualitat a la recentment renovada secció web [Sistema de qualitat- SAIQU](#), accessible des de la pàgina web principal a través del menú superior *La Facultat* també des del conjunt de drecceres situat a l'esquerra de la pàgina principal. En aquesta secció es pot trobar la política i objectius de qualitat, la informació sobre la comissió de qualitat i la seva composició i funcions, el SAIQU en què s'emmarquen les titulacions i la revisió i millora del sistema així com la informació relativa als processos del marc VSMA, entre d'altres.

Des d'aquesta secció també es pot accedir mitjançant accessos directes a la informació mencionada abans referent a les dades, indicadors i enquestes dels ensenyaments oficials de la facultat.

Estàndard 3. Eficàcia del sistema de garantia interna de la qualitat (SAIQU/SGIQ) dels ensenyaments de la Facultat de Química

«La institució disposa d'un sistema de garantia interna de la qualitat formalment establert i implementat que assegura, de manera eficient, la qualitat i la millora continuada de la titulació.»

Preàmbul

El SAIQU de la Facultat de Química està sent sotmès a una anàlisi i revisió profundes, amb l'horitzó de la seva certificació al llarg de l'any 2020. En aquest context s'ha redefinit la composició de la Comissió de Qualitat del centre, per tal d'incloure com a membres nats tots els responsables acadèmics dels ensenyaments oficials de grau i màster de la facultat, s'ha redefinit el mapa de processos, s'està revisant un nombre alt de processos del SAIQU, se n'ha creat d'altres nous i s'han elaborat els primers informes de revisió del SAIQU.

Amb aquestes accions es pretén donar resposta als dubtes i àrees de millora detectats durant la visita del comitè d'avaluació externa, tal com va quedar reflectit en l'informe de visita i informe d'acreditació, en que alguns dels subestàndards d'aquesta dimensió van ser valorats amb un *“assoliment amb condicions”*.

3.1 Que el SGIQ implementat té processos que garanteixin el disseny, l'aprovació, el seguiment i l'acreditació de les titulacions.

Per tal d'optimitzar la implementació del marc VSMA a la Facultat de Química s'ha optat per analitzar i revisar l'anterior PEQ 020, que ara rep el nom *“Gestió de la qualitat dels programes formatius en el marc VSMA (Verificació, Seguiment, Modificació i Acreditació)”* i n'és el responsable propietari el Vicedegà d'Ordenació Acadèmica i Qualitat. L'actual PEQ020 contempla quatre subprocessos segons les etapes del marc VSMA:

- PEQ 021. Disseny, aprovació i verificació de títols oficials de grau i màster.
- PEQ 022. Seguiment i millora contínua de títols oficials de grau i màster.
- PEQ 023. Modificació de títols oficials de grau i màster.
- PEQ 024. Acreditació de títols oficials de grau i màster.

A més, aquest desglossament i creació de nous PEQs permet donar resposta a l'acció de millora TC-024-E31-17-01, que té com a objectiu *“Dissenyar i implementar el procés per a l'acreditació dels programes formatius”*, derivada d'una observació inclosa en l'informe de visita externa del CAE durant el procés d'acreditació, en la que es destacava l'absència d'un procés dedicat a l'acreditació dels ensenyaments oficials.

3.2 Que el SGIQ implementat garanteix la recollida d'informació i dels resultats rellevants per a la gestió eficient de les titulacions, en especial els resultats acadèmics i la satisfacció dels grups d'interès.

El procés PEQ 130 "Anàlisi dels resultats i millora del sistema" està sent revisat en el context de la revisió del SAIQU que s'està duent a terme actualment. En aquesta nova versió, es proposa una nou títol ("Recollida d'informació i anàlisi de resultats per a la millora dels ensenyaments"), es modifica la cadena de responsabilitats (amb la designació del Director de la Comissió de Qualitat com a responsable propietari del procés) i es té cura que reculli els mecanismes i el circuit d'informació entre unitats de la UB pel que fa a l'accés, recollida i anàlisi de dades referents als resultats sobre l'aprenentatge, la inserció laboral i de satisfacció. Respecte la seva versió anterior, el PEQ130 ara també recull les enquestes pròpies impulsades des de la facultat, a més de les institucionals.

A continuació es mostra un llistat de les enquestes institucionals (Taula 3.2) i pròpies de la Facultat (Taula 3.3), distingint les que es duen a terme des del centre per a qualsevol ensenyament i les pròpies de cada titulació:

Taula 3.2 Recull d'enquestes institucionals de la UB relatives als màsters que imparteix

Enquesta	ADREÇAT A	MOMENT	FORMAT	PERIODICITAT	INICI
Enquesta d'opinió de l'alumnat sobre assignatures i/o professorat de graus i màsters universitaris	Estudiants	Al final del semestre	En línia	Semestral	2009
Enquesta d'opinió al professorat sobre els programes formatius de graus i màsters universitaris	Professors	Durant el procés d'acreditació de titulacions	En línia	Semestral	2015
Enquesta als estudiants sobre serveis, instal·lacions i activitats	Estudiants	Durant el semestre	En línia	Annual	2011
Enquesta de satisfacció de titulats i titulades de màster	Titulats de màster	En titular-se	En línia	Annual	2018
Enquesta d'inserció laboral (AQU)	Titulats de cicles, màsters i doctorat	Al cap de tres anys	Per telèfon	Cada 3 anys	2001
Enquesta estudi ocupadors (AQU)	Empreses i institucions	Puntual	Per telèfon	Puntual	2014

En el cas del màster en Modelització Computacional Atòmica i Multiescala en Física, Química i Bioquímica cal destacar que, tot i el baix nombre d'enquestes recollides, la participació ha superat el 50% de matriculats en totes aquestes assignatures, valor superior a la mitjana de participació dels alumnes de màster de la UB, que és del 35%. Tot i així, fomentar la participació en les enquestes és un objectiu general dels graus i màsters que s'imparteixen a la Facultat de Química per obtenir informació acurada i estadísticament significativa i per aquest motiu s'han posat en marxa diferents accions i propostes de millora per incrementar la participació dels estudiants en les enquestes, tant a nivell de cada titulació com a nivell de centre. Els mecanismes de recollida específics del màster es descriuen a la Taula 3.3.

Taula 3.3 Recull de mecanismes de recollida d'informació pròpies del Màster

Enquesta del Màster en Modelització Computacional Atòmica i Multiescala en Física, Química i Bioquímica	ADREÇAT A	MOMENT	FORMAT	PERIODICITAT	INICI
Enquesta de satisfacció general dels egressats	Titulats de màster	Final semestre	Web	Anual	2019
Informe de satisfacció dels estudiants (taula rodona)	Estudiants	Final semestre	Taula rodona d'estudiants /informe	Anual	2019

Aquest darrer mecanisme de recollida d'informació sorgeix d'una experiència recent d'aquest màster en el moment d'elaborar aquest informe. A petició d'AQU hem volgut participar en un programa pilot per completar enquestes i millorar la recollida d'informació sobre els estudis de màster que estan cursant els alumnes matriculats del màster aquest curs. En aquest cas, la informació es recull en un informe que resumeix les opinions dels estudiants del curs actual (2018-19) que discuteixen en una taula rodona sobre diferents aspectes concrets de funcionament, gestió i continguts del màster que l'AQU els proposa en un document de treball. Es designen dos estudiants que fan de moderadors i que s'encarreguen de fer un informe de la reunió amb les conclusions i propostes de millora que s'han discutit. Les dades que ofereix aquest tipus d'informe elaborat amb una discussió i anàlisi col·lectius són realment interessants i poden ser molt útils per determinar els punts forts i febles del màster que difícilment s'obtidrien a partir d'enquestes individuals anònimes o a partir d'entrevistes, especialment les que facin referència al funcionament, coordinació i continguts del màster.

3.3 Que el SGIQ implementat es revisa periòdicament i genera un pla de millora que s'utilitza per a la seva millora continuada.

La revisió general del SAIQU ha contemplat, entre d'altres, l'elaboració d'un procés dedicat a la revisió del SAIQU que contempla la creació d'un pla de millores (segons model suggerit per l'APQUB) i la redacció de l'informe de revisió del SAIQU, que passa a tenir caràcter anual, amb una primera edició el febrer de 2018 i una segon el febrer del 2019.

Pel que fa al nou procés de revisió, i a com a resposta a l'informe de visita del CAE, es va proposar l'acció de millora TC-170-E33-17-01 ("Revisar i implementar el procés per a la revisió del SAIQU") i s'ha creat el procés PEQ 170 (amb codi encara per confirmar i harmonitzar amb el codi suggerit per l'APQUB), amb el títol "Revisió del sistema d'assegurament intern de la qualitat". Aquest procés inclou els mecanismes per a la creació i actualització del Manual de Qualitat, Pla de Millora i de l'informe de revisió del SAIQU (veure [l'informe de revisió](#)).

En aquest context de revisió del SAIQU de la Facultat de Química, s'ha decidit que el PEQ 100 ("Gestió de peticions"), revisat recentment a partir del PEQ anterior ("Gestió de queixes, reclamacions i suggeriments), sigui un dels motors claus per al seguiment i millora dels processos del SAIQU, tot i potenciant les bústies de queixes i de consultes recentment impulsades per la Secretaria General de la UB, sense menystenir la gestió de peticions arribades via correu electrònic i instàncies. El Pla de Millores inclou una acció de millora que permeti obtenir i analitzar dades relacionades amb les peticions rebudes al centre.

Estàndard 4: Adequació del professorat al programa formatiu

« El professorat que imparteix docència a les titulacions del centre és suficient i adequat, d'acord amb les característiques de les titulacions i el nombre d'estudiants.»

4.1 El professorat reuneix els requisits del nivell de qualificació acadèmica exigits per les titulacions del centre i té una experiència docent, investigadora i, si escau, professional suficient i valorada.

Els estudis d'aquest màster s'imparteixen conjuntament per la Universitat de Barcelona (UB) i la universitat politècnica de Catalunya (UPC). La docència d'aquest màster es desenvolupa en les Facultats de Química (coordinadora) i Física de la UB i la Facultat d'Informàtica de Barcelona (FIB) del Campus Nord de la UPC i va ser proposat amb l'esperit de ser un màster del campus Barcelona Knowledge Campus ([BKC](#)). A més a més es disposa de convenis de col·laboració amb l'Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC) i l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB) del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) així com amb el Barcelona Supercomputing Center (BSC) per poder involucrar en la docència del màster investigadors d'aquests centres que tenen una activitat de recerca molt activa en l'àmbit de la modelització computacional i que poden aportar una experiència complementària molt important en la docència d'algunes assignatures del màster. És important ressaltar que els professors que participen en la docència d'aquest màster tenen una llarga trajectòria de recerca en àmbits afins als continguts de les matèries que s'imparteixen en el màster i aporten una visió molt activa i actualitzada dels avenços científics en les seves àrees de coneixement.

a) Experiència docent i investigadora del professorat

El 100% dels professors estables del màster són doctors vinculats als departaments i institucions descrites en la presentació (UB, UPC i CSIC), amb al menys dos trams de recerca, l'últim viu, i més del 80 % té tres o més trams de recerca. Tots ells participen en projectes de recerca finançats en els quals la modelització computacional és essencial, fet que justifica que tots ells tenen una experiència consolidada en diferents àmbits de la modelització computacional multiescala aplicada a problemes físics, químics i bioquímics. Una taula resum amb les dades relatives als trams de recerca i docència del professorat, juntament amb el detall dels projectes de recerca actius en què participen, es pot trobar en aquest [link](#).

A les **taules 3.4 i 3.5** es recullen els detalls del professorat implicat en el màster durant els cursos 2015-16 i 2016-17. Durant el curs 2015-16 no es van poder fer 4 assignatures optatives pel baix nombre d'alumnes matriculats i el curs 2016-17, només 2. Durant el curs 2017-18 no es va poder ofertar l'assignatura de "Superfícies i Catàlisi" per tercer curs consecutiu, fet pel qual es va crear una nova assignatura de "Modelització de Nanomaterials i Superfícies" de d'abast més general per cobrir el tipus d'aplicacions que es fan en aquest camp i poder desenvolupar satisfactòriament totes les competències específiques i els continguts de la matèria a la que pertany aquestes assignatures optatives.

Taula 3.4. Professors de la UB durant els cursos 2015-16, 2016-17 i 2017-2018:

Curs 2015-16	PDI	%PDI	Doctors	%Doctors	TC	%TC	Acr.	%Acr.
CU	5	35,7%	5	100%	5	100%	5	100%
TU	2	14,3%	2	100%	2	100%	2	100%
Prof. agregat	7	50%	7	100%	7	100%	7	100%
TOTAL 2015-16	14	100%	14	100%	14	100%	14	100%
Curs 2016-17								
CU	9	33,3%	9	100%	9	100%	9	100%
TU	4	14,8%	4	100%	4	100%	4	100%
Prof. agregat	9	33,3%	9	100%	9	100%	9	100%
Prof. associat	3	11,1%	3	100%	0	0%	1	33,3%
Investigador	2	7,4%	2	100%	2	100%	0	0%
TOTAL 2016-17	27	100%	27	100%	24	88,9%	23	85,2%
Curs 2017-18								
CU	7	28%	7	100%	7	100%	7	100%
TU	4	16%	4	100%	4	100%	4	100%
Prof. agregat	9	36%	9	100%	9	100%	9	100%
Prof. associat	2	8%	2	100%	0	0%	1	50%
Investigador	3	12%	2	66,7%	3	100%	0	0%
TOTAL 2017-18	25	100%	24	96%	23	92%	21	84%

Font: taula E41 del [VSMA](#).

Taula 3.5. Professors de la UPC durant els cursos 2015-16, 2016-17 i 2017-2018:

Curs 2015-16	PDI	%PDI	%Doctors	TC	%TC
CU	2	22,2	100	2	100
TU	4	44,4	100	4	100
Professor agregat	3	33,3	100	3	100
TOTAL 2015-16	9	44,4	100	9	100
Curs 2016-17					
CU	3	30,0	100	3	100
TU	4	40,0	100	4	100
Professor agregat	3	30,0	100	3	100
TOTAL 2016-17	10	100	100	10	100
Curs 2017-18					
CU	4	36,4	100	4	100

TU	4	36,4	100	4	100
Professor agregat	3	27,2	100	3	100
TOTAL 2017-18	11	100	100	11	100

Font: coordinador (no disposa de la informació detallada sobre acreditacions).

Finalment, han participat en la docència d'algunes assignatures un professor investigador (2015-16 (15 hores), 2016-17 (15 hores), 2017-18 (15 hores)) i un científic titular (2016-17 (15 hores), 2017-18 (15 hores)) tots dos funcionaris del CSIC, així com un professor ICREA (2015-16 (15 hores), 2016-17 (15 hores), 2017-18 (15 hores)). Aquestes dades no consten a l'aplicatiu VSMA.

El perfil del professorat que ha participat en la direcció dels TFM s'ajusta al perfil descrit ja que dels directors dels treballs finals de màster presentats fins ara són investigadors doctors adscrits a la UB, la UPC o del CSIC (incloent dos investigadors ICREA i un investigador postdoctoral (programa Ramon y Cajal)). Per altra banda, els tribunals que han avaluat els treballs presentats s'han constituït amb professors del Màster amb els perfils descrits amb experiència consolidada en diversos camps de la modelització computacional atòmica i multiescala per poder avaluar amb rigor els treballs presentats.

b) Encàrrec docent i assignació docent

La comissió coordinadora del màster fa l'encàrrec docent als departaments i aquests decideixen quins professors hi assignen, d'entre tots els membres del departament. En aquest procediment es té en compte la trajectòria, categoria professional, experiència, la disponibilitat i expertesa en les temàtiques més especialitzades que, per la seva naturalesa, són habituals en aquests títols.

L'assignació del professorat per a la tutorització de TFM discorre pels mateixos canals departamentals que s'han assenyalat, tot i què el fet que hagin sigut un nombre reduït d'alumnes ha afavorit que la majoria de tutors/directors siguin professors del Màster. En conseqüència, també els tutors de TFM reuneixen un alt nivell de qualificació acadèmica i experiència per poder dirigir treballs que impliquen una certa especialització.

Atesa la natura especialitzada de la major part dels treballs finals de màster que es realitzen, l'oferta de treballs finals està vinculada en major o menor mesura a les principals línies de recerca dels grups dels departaments participants. D'altra banda, també és permès que els estudiants puguin desenvolupar el seu treball en empreses o institucions alienes al centre o per iniciativa pròpia a partir d'un projecte de l'estudiant. En aquests casos la Comissió Coordinadora assigna a un professor del màster, amb experiència en la temàtica general del treball, com a tutor per fer el seguiment amb col·laboració d'un tutor/director extern. Durant el curs 2017-18 un alumne ha realitzat el seu TFM en aquest règim a la Facultat de Química de la UAB i durant el curs 2018-19 ho està fent un altre alumne a l'ICMAB (CSIC).

4.2 El professorat del centre és suficient i disposa de la dedicació adequada per desenvolupar les seves funcions i atendre els estudiants.

De tot el professorat que imparteix docència en el Màster en Modelització Computacional Atòmica i Multiescala, bona part també participa en d'altres ensenyaments de grau o de

màster de la UB i de la UPC. Pràcticament tota la docència recau en el professorat a temps complet (catedràtics, titulars, agregats i lectors) de la UB i de la UPC però també s'incorpora una quantitat d'investigadors del CSIC i ICREA que, per la seva llarga experiència investigadora en certs camps, aporten una qualitat molt important a la docència d'algunes matèries.

La docència els cursos 2015-16, 2016-17 i 2017-18 ha sigut coberta per professors (catedràtics, titulars i agregats) a temps complet de la UB i de la UPC amb la participació en tres assignatures d'un professor investigador (2016-17 (15 hores), 2017-18 (15 hores), 2018-19 (15 hores)) i un científic titular (2016-17 (15 hores)), tots dos funcionaris del CSIC, així com dos professors ICREA (2015-16 (15 hores), 2016-17 (15 hores), 2017-18 (15 hores), 2018-19 (25 hores)). Aquestes dades no consten a l'aplicatiu VSMA. Pel que fa el curs 2015-16, el resum d'hores dedicades a la docència d'aquest màster es resumeix a les taules 3.6 i 3.7.

Taula 3.6. Hores de docència impartides per professors de la UB durant els cursos 2015-16,2016-2017 i 2017-18:

Curs 2015-16	PDI	%PDI	Doctors	%Doctors	TC	%TC	Acreditat	%Acreditat
CU	130	38,0	130	100	130	100	15	11,5
TU	60	17,5	60	100	60	100	60	100
Professor agregat	152	44,4	152	100	152	100	122	80,3
TOTAL 2015-16	342	100	342	100	342	100	197	57,6
Curs 2016-17								
CU	290	41,1	290	100	290	100	16	5,5
TU	137	19,4	137	100	137	100	107	78,1
Professor agregat	211	29,9	211	100	211	100	157	74,4
Professor associat	36	5,1	36	100	0	0	10	27,8
Investigador	32	4,5	32	100	32	100	0	0
TOTAL 2016-17	706	100	706	100	670	95	290	41,1
Curs 2017-18								
CU	315	43,0	315	100	315	100	16	5,5
TU	137	18,7	137	100	137	100	107	78,1
Professor agregat	211	28,9	211	100	211	100	157	74,4
Professor associat	36	4,9	36	100	0	0	10	27,8
Investigador	32	4,4	32	100	32	100	0	0
TOTAL 2017-18	731	100	766	100	670	95	290	41,1

Font: taula 4.2 del VSMA i coordinador.

Taula 3.7. Hores de docència impartides per professors de la UPC durant els cursos 2015-16, 2016-2017 i 2017-18:

Curs 2015-16	PDI	Doctors	%Doctors	TC	%TC
CU	35	35	100	2	100
TU	60	60	100	4	100
Professor agregat	70	70	100	3	100
TOTAL 2015-16	165	165	100	9	100
Curs 2016-17					
CU	50	50	100	3	100
TU	60	60	100	4	100
Professor agregat	70	70	100	3	100
TOTAL 2016-17	180	180	100	10	100
Curs 2017-18					
CU	65	65	100	4	100
TU	60	60	100	4	100
Professor agregat	70	70	100	3	100
TOTAL 2017-18	195	195	100	11	100

Font: coordinador (no disposa de la informació detallada sobre acreditacions).

Aquest curs 2018-19 s'ha ofertat una nova assignatura optativa "Modelització de Nanomaterials i Superfícies" que dona un enfoc més general i que ha tingut una acceptació millor que l'anterior i serà impartida per dos professors i un investigador ICREA de la UB amb una gran experiència en aquesta temàtica.

L'increment d'estudiants en aquests dos últims cursos ha fet créixer significativament la relació estudiants ETC per PDI ETC (estimat com a ECTS presencials, excloent el TFM, tenint en compte tot el professorat (UB, UPC i CSIC)) es de 5,3 el 2015-16; fins 9,3 al 2016-17; fins el 12,4 el 2016-17. Tot i aquest increment, aquests valors indiquen que la dedicació i el seguiment per part del professor al grup classe permet una atenció a l'alumne bastant individualitzada que es valora positivament, com indiquen les enquestes disponibles. Cal assenyalar, però, que la participació dels estudiants en les enquestes ha sigut molt baixa i, en general, poc representativa del nivell de satisfacció amb les activitats docents realitzades. La millora de la participació en les enquestes és un dels aspectes que es pretén millorar durant aquest curs 2018-19.

Disposem doncs de professors suficients amb la dedicació i expertesa adequada per desenvolupar les seves funcions docents.

4.3 La institució ofereix suport i oportunitats per millorar la qualitat de l'activitat docent i investigadora del professorat

La Secció d'Universitat de l'Institut de Desenvolupament Professional-ICE (IDP-ICE) és responsable de programar el **Pla de Formació del Professorat de la UB**, per complir el precepte estatutari que recull com a dret del PDI «tenir accés a la formació permanent, amb la finalitat de garantir la constant millora de la qualitat de la tasca docent i investigadora», amb l'objectiu general: impulsar la professionalització del professorat i contribuir a la millora de la qualitat de la docència universitària, a través del disseny, l'organització i la gestió de la formació permanent, i de l'assessorament, la informació i l'assistència tècnica al PDI. El pla de formació del PDI a través de diferents programes formatius de formació en docència (per a professorat novell i experimentat), en tutories, en bones pràctiques docents, en idiomes, en gestió o en projectes, és accessible a través de:

<http://www.ub.edu/ice/content/professorat-universitat>

El pla de formació i els cursos que s'ofereixen poden ser tant a iniciativa de l'ICE com del centre.

La UB ofereix suport i un seguit d'oportunitats al seu professorat per tal de millorar la qualitat de l'activitat docent i investigadora. Aquest suport es troba articulat a través el Programa de Recerca, Innovació i Millora de la Docència i l'Aprenentatge (RIMDA), promogut pel Vicerectorat de Docència i Ordenació Acadèmica, i a través de l'IDP-ICE.

El Programa RIMDA ofereix solucions que permetin donar una resposta adequada a les noves exigències acadèmiques i que fomentin la millora de la qualitat de la docència a la Universitat de Barcelona. Contempla i integra els tres eixos presents als programes més avançats en la formació del professorat universitari: la formació pedagògica i didàctica, la innovació docent i la recerca en docència universitària. En síntesi, aquest programa integra la formació i la innovació docent amb la recerca i documentació dels processos docents innovadors. Planteja la posada en pràctica de les innovacions com un procés d'indagació i exigeix la participació cooperativa dels professors en totes les fases del procés (acció-observació-reflexió), com a estratègia que permet i promou la col·laboració entre els docents i la construcció de les competències requerides per a la millora de la qualitat docent. Amb aquest propòsit cada any hi ha dues convocatòries de projectes d'innovació docent (PID) que poden ser sol·licitats pel professorat del centre amb els que, a més del reconeixement oportú, el professorat implicat pot rebre assessorament des del RIMDA per part d'experts en estratègies d'aprenentatge. El Programa RIMDA també contempla la creació de Grups D'Innovació Docent (GID), constituïts per equips de professorat interessats en línies concretes d'innovació docent.

Amb l'objectiu d'aconseguir que la innovació docent sigui molt més transversal en els centres, el Programa RIMDA ha iniciat una estratègia de millora i innovació docent de centre, amb l'objectiu de desenvolupar les línies prioritàries d'aprenentatge i innovació que cada centre consideri més oportunes. La Facultat de Química és el tercer centre de la Universitat de Barcelona on aquest nou programa es posarà en marxa a partir de Gener de 2019 (Programa RIMDA-QUÍMICA), on s'han identificat cinc línies d'aprenentatge i innovació prioritàries per a la Facultat de Química (Aula inversa – modalitat *Just in Time Teaching* -, Aula inversa – modalitat *Team Based Learning* -, Aprenentatge basat en problemes, Aprenentatge basat en casos i Aprenentatge-servei). Des del RIMDA s'està formant a cinc professors del centre com a futurs assessors de cadascuna d'aquestes línies prioritàries d'innovació els quals, un cop iniciat el Programa guiaran, ajudaran i assessoraran a tot el professorat de la Facultat que vulgui implementar durant els propers dos anys alguna d'aquestes estratègies d'innovació docent.

Per altra banda, l'IDP-ICE de la UB proporciona també suport al professorat del centre mitjançant l'anàlisi de les necessitats de formació de professorat, afavorint innovacions educatives, promovent, assessorant i orientant la recerca en els àmbits d'actuació de Institut, desenvolupament accions d'assessorament, de publicació i de difusió de bones pràctiques i elaborant materials per a la formació en diferents suports. Així, l'IDP-ICE organitza diverses edicions l'any de cursos de formació de professorat en diversos àmbits: competències docents (metodològica, digital, comunicativa i interpersonal, de planificació i gestió docent), desenvolupament personal i professional, així com programes de formació en recerca (per professorat i joves investigadors) i de formació en gestió. Cada dos anys, l'IDP-ICE convoca un Programa de Recerca en Docència Universitària (REDICE) per tal que els professors interessats puguin portar a terme un estudi de recerca en docència, i en la darrera convocatòria ha convocat el Programa REDICE-ACCIÓ que té com a objectiu ajudar als grups docents que han tingut un projecte REDICE a publicar els resultats de la recerca portada a terme.

Pel que fa a l'IDP-ICE, alguns professors del màster adscrits a la Facultat de Química participen en diferents projectes REDICE (*Redice Acció-16-1160 "Avaluació de les competències de raonament i esperit crític en alumnes del Grau de Química de la Universitat de Barcelona"*, I.P. Joan Antoni Farrera Piñol; *Redice18-2223 "L'avaluació continuada i la seva influència en el procés d'ensenyament-aprenentatge en el Grau de Química de la Universitat de Barcelona. Estudi sobre els èxits, mancances i reptes pendents"*, I.P. Joan Antoni Farrera Piñol) i del programa RIMDA en diferents grups d'innovació docent reconeguts (GINDOC-UB/110: "Química a la interfase secundària universitat" (QISU), Coordinació: Francesc A. Centellas; GINDO-UB/112: "Química Física Experimental" (QuiFiExp), Coordinació: Jordi Ignés). En el cas dels professors del màster adscrits a la facultat de Física, destaquem la participació activa d'alguns d'ells en el projecte d'innovació docent 2017PID-UB/013 (Física Computacional: un laboratorio de programación colaborativa, Coordinació: Bruno Julià Díaz), amb una temàtica afí al màster.

Pel que fa a si la institució ofereix suport i oportunitats per millorar la qualitat de l'activitat investigadora del professorat, cal recordar que l'actual Pla de Dedicació Acadèmica de la UB (en procés de revisió) permet una reducció de l'activitat docent del PDI permanent si acredita un suficient nombre d'inputs i outputs de recerca, en concret per als grups A-A, A-B i B-A. Més del 60% del PDI permanent de la UB que participa en el màster té dret a una reducció en la seva activitat docent a causa de la seva elevada productivitat científica. Malauradament, les restriccions en força docent en les plantilles departamentals de les Facultats de Química i de Física de la UB fa que sovint el PDI no pugui aprofitar tot el descompte docent a la que té dret, i només es pugui aprofitar parcialment de les reduccions en el seu encàrrec docent.

Finalment cal esmentar que tant la UB com la UPC ofereixen nombrosos cursos i jornades formatives dirigides a millorar l'activitat docent del professorat que organitzen els corresponents Instituts de Ciències de l'Educació (ICE). A la taula E46 de l'espai VSMA de la UB es recullen algunes de les activitats de formació que han rebut els professors del màster adscrits a la UB. Pel que fa els professors adscrits a la UPC, durant el curs 2015-16, al menys 6 professors del màster han seguit 8 cursos del ICE i durant el 2016-17, 5 professors i 7 cursos. Aquests valors indiquen que aproximadament un 20% del professorat participa cada any en aquests cursos. La formació rebuda en alguns d'aquests cursos ha sigut útil per millorar alguns aspectes relacionats amb la docència de les assignatures del màster i s'intentarà incrementar la participació del professorat en aquestes activitats formatives.

Estàndard 5: Eficàcia dels sistemes de suport a l'aprenentatge

La Universitat de Barcelona, en general, i la Facultat de Química, en particular, posen a la disposició dels seus estudiants un seguit de serveis i recursos per motivar, facilitar i enriquir el seu aprenentatge. En aquest apartat es recullen i és discuteixen les evidències per tal de mostrar que els recursos disponibles de suport a l'alumnat són adequats i s'ajusten al pla d'estudis de cadascuna de les titulacions.

5.1 Els serveis d'orientació acadèmica suporten adequadament el procés d'aprenentatge i els d'orientació professional faciliten la incorporació al mercat laboral

La UB ha impulsat que als centres hi hagi professors tutors que ajudin de manera personalitzada a l'adaptació a la vida universitària, a aprofitar els recursos que ofereix la Universitat, a millorar el rendiment acadèmic, a seleccionar les assignatures més adequades i també a preparar els alumnes per a la inserció professional. L'actuació del professor tutor brindar una atenció personalitzada als estudiants ajustada a les circumstàncies, necessitats i característiques del tipus d'alumnat que li permeti d'assentar les bases del seu aprenentatge al llarg del temps. El pilar central d'aquestes actuacions és el Pla d'Acció Tutorial (PAT), que, a la Facultat de Química, s'ha desenvolupat de manera independent, però coordinada, per cadascun dels ensenyaments del centre per tal d'adaptar-lo a cada situació concreta.

La Facultat de Química, atenent al seu compromís expressat en la seva política de qualitat, assumeix com a prioritat endegar activitats per a facilitar la inserció laboral dels seus estudiants i posteriors graduats. En aquest sentit, desenvolupa des de fa anys accions per a fomentar l'ocupabilitat, en la que poden participar estudiants de tots els ensenyament graus com de màster, les quals es vehiculen avui dia al voltant de tres activitats principals:

- La Fira d'Empreses
- L'Speed Networking
- Tallers d'Orientació Ocupacional

Aquestes tres activitats, que es desenvolupen en col·laboració amb el Servei d'Atenció a l'Estudiant i, en algun cas, amb altres Facultats, estan orientades a apropar el sector empresarial als nostres estudiants, facilitant que l'estudiant pugui accedir a un primer coneixement del món laboral en un entorn conegut i més segur per a ells com és la Facultat.

La **Fira d'Empreses** és actualment l'activitat adreçada a l'ocupabilitat que més impacte obté. Originàriament impulsada des de la Facultat de Física, la Fira actualment aplega, a més de les Facultats de Física i Química, altres centres de la UB de l'àmbit de les ciències exactes i experimentals, tal com les Facultats de Biologia, Ciències de la Terra i Matemàtiques. Amb la Fira d'Empreses, s'ofereix l'oportunitat per a què els estudiants estableixin un primer contacte amb empreses que desenvolupen la seva activitat en àmbits relacionats amb els estudis que estan cursant. D'aquest contacte estudiant-empresa en pot sorgir una beca, un conveni per estada en pràctiques externes o un contracte de treball. En una tendència creixent des de la primera edició l'any 2006, l'edició d'enguany 2018 ha acollit més de 100 empreses i s'hi han inscrit més de 1000 estudiants.

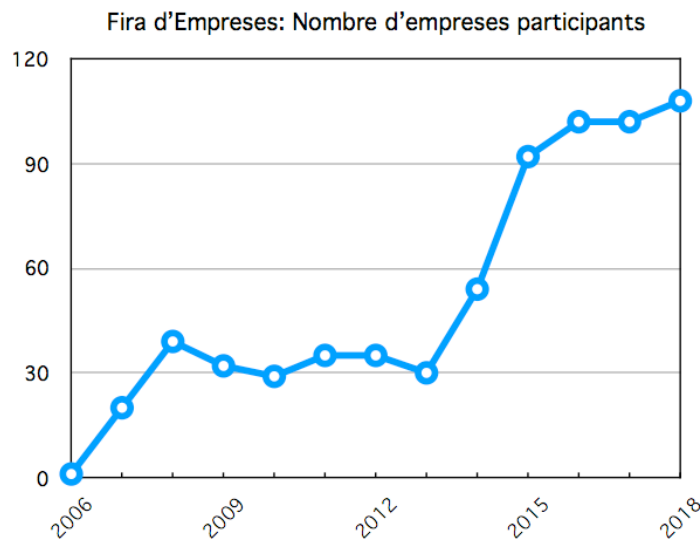


Figura 3.1. Evolució temporal de les nombre d'empreses participants a la Fira d'Empreses.

L'Speed Networking és un format d'entrevistes dissenyat per accelerar contactes professionals, en què els estudiants participants tenen la possibilitat de presentar-se al personal d'una empresa amb una presentació molt breu (2 minuts estrictes), anomenada "elevator pitch". Aquesta activitat es desenvolupa a la nostra Facultat des de l'any 2015. La pròpia natura de l'activitat fa que s'hagi de limitar la participació al voltant d'una desena d'empreses del sector químic i prop de 65 estudiants de darrer curs de Grau o bé de Màster. En les edicions celebrades fins ara s'ha assolit un notable èxit de participació i una gran satisfacció dels participants, generant-se ofertes de pràctiques externes i alguns contractes laborals. Per citar l'exemple més recent el 80% dels estudiants valoraven amb satisfacció màxima o gairebé màxima l'activitat i consideraven que els seria molt útil pel seu futur professional.

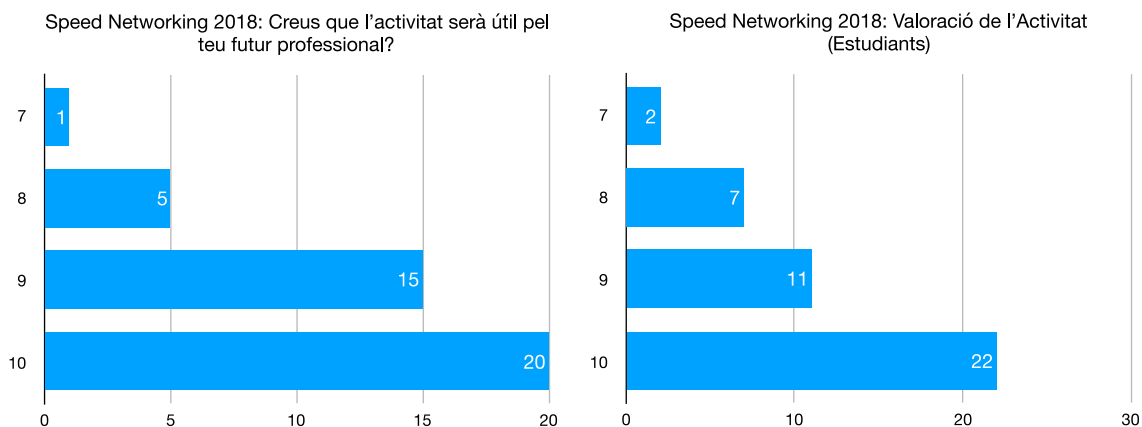


Figura 3.2. Principals resultats de l'enquesta de satisfacció dels estudiants amb l'activitat de l'Speed Networking

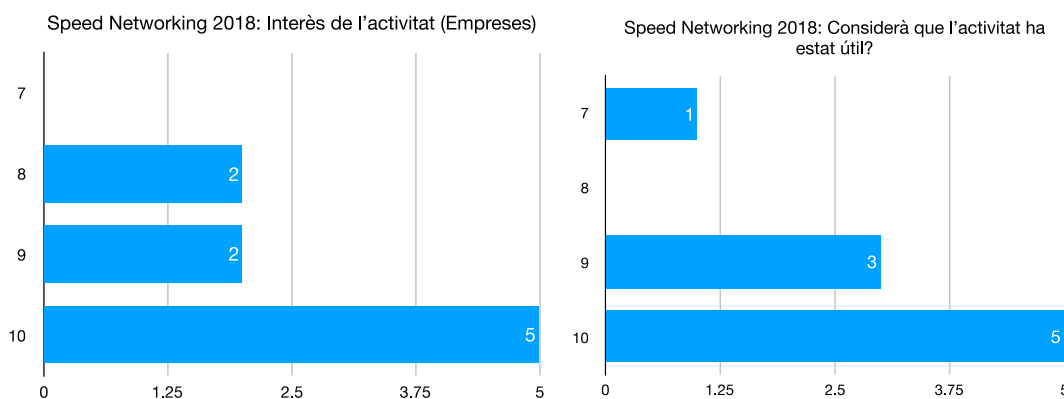


Figura 3.3. Principals resultats de l'enquesta de satisfacció de les empreses amb l'activitat de l'Speed Networking

De manera similar, 7 de les 9 empreses participants valoraven molt satisfactòriament l'Speed Networking i trobaven utilitat en aquesta jornada d'entrevistes llampec. Diverses empreses van manifestar el seu interès en què el taller es celebrés dos cops l'any.

Pel que fa als **Tallers d'Orientació Ocupacional** al voltant de la Fira d'Empreses i l'Speed Networking, la Facultat organitza activitats formatives complementàries que tenen com a finalitat donar pautes i consells pràctics a l'estudiant perquè pugui preparar la seva presentació a les empreses i incrementar les seves possibilitats de ser triat. Aquestes activitats poden ser tallers pràctics, taules rodones amb participació de representants de la indústria o cafès col·loqui en els que una empresa del sector té una reunió oberta i distesa amb un nombre reduït d'estudiants. En aquest aspecte cal agrair la participació del Servei d'Atenció d'Es de la UB, que és un element essencial per a dur a terme aquests tallers.

- Alguns exemples de tallers en són: Preparació del currículum vitae / L'entrevista de feina / Com presentar el teu CV en 2 minuts davant una empresa / Elevator Pitch: Aprofita i mostra el teu talent
- Alguns exemples de taules rodones en són: "Falsos Mites: jo comercial? Per què no?" / "Taula rodona amb exalumnes emprenedors: Crear una empresa? Per què no?"
- Alguns exemples d'empreses en cafès col·loquis:

Les activitats per al foment de l'ocupabilitat a la Facultat de Química es difonen de manera general a través de les pantalles d'informació, la web de la Facultat i les Xarxes Socials. A més, donat que creiem que cal donar una atenció particularitzada als alumnes en el darrer curs de grau així com als estudiants de Màster, la Facultat té creat un espai en el Campus Virtual anomenat "Campus d'Ocupabilitat" on s'hi fa difusió d'aquestes activitats de manera directament adreçada a aquests col·lectius.

Totes aquestes activitats es complementen amb un servei de gestió de pràctiques externes molt actiu. Tot i que les titulacions de Grau que s'imparteixen a la Facultat de Química no contemplen la realització de pràctiques externes com a activitat acadèmica obligatòria, des del centre es gestiona cada curs més de 400 projectes formatius de pràctiques externes, dels que prop de la meitat són de tipus curricular. El centre disposa d'una enquesta de satisfacció per als estudiants que realitzen pràctiques externes, tant de tipus curricular com extracurricular. Tanmateix, la recollida de la informació d'aquestes enquestes no es duu a terme de manera molt sistemàtica i la seva anàlisi caldria desitjar que fos més quantitativa. En aquest sentit,

s'inclou al pla de millores una acció orientada a la "Sistematització i millora de l'anàlisi de les enquestes de satisfacció de Pràctiques Externes".

El PAT del Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica

Com s'ha mencionat a l'inici d'aquest subestàndard des del centre s'ha promogut que tots els ensenyaments oficials del centre desenvolupin el seu propi pla d'acció tutorial adaptat a les necessitats concretes de cada ensenyament. Així doncs, en el cas dels màsters la heterogeneïtat entre els diferents plantejaments és més elevada que en el cas dels graus. Tot seguit es recullen de forma resumida els trets principals dels plans d'acció tutorial dels ensenyaments de màster del centre

Les accions de suport i d'orientació dels estudiants es donen en tres estadis diferents segons es tracti d'estudiants que estiguin acabant el grau, graduats que estiguin interessats en matricular-se i una vegada matriculats en el màster.

- a) Informacions i accions prèvies a la matrícula: a la [pàgina web del màster](#) es troba tota la informació relativa als requisits d'accés, objectius, horaris etc. del màster i es presenten les dades bàsiques del procediment de preinscripció i matrícula que es gestiona des de la Secretaria d'Estudiants i Docència de Química (Postgrau) de la Facultat de Química de la UB. Per altra banda, durant els darrers anys, al maig-juny s'organitzen diferents sessions informatives sobre el màster a les Facultats de Química i Física de la UB (estenenent la crida al Campus Nord de la UPC) com a l'Escola d'Enginyeria de Barcelona Est de la UPC, al Campus Diagonal-Besòs. Paral·lelament es van responent les diferents consultes que arriben al coordinador a través de la web del la UB com a través de [l'aplicatiu d'informació sobre títols de grau i màster de la UPC](#).
- b) Pels graduats que estiguin interessats en matricular-se del màster els aspectes administratius es resolen per dues vies: contactant directament a la Secretaria d'Estudiants i Docència de Química (Postgrau) de la Facultat de Química de la UB o contactant amb el coordinador. Aquesta informació és fàcilment accessible a [la pàgina web d'accés i preinscripció](#).
- c) Pels alumnes que es matriculen en el màster el procediment de suport i orientació està establert en [el Pla d'acció Tutorial del Màster \(PAT\)](#), aprovat aprovat per la Comissió Coordinadora el 15/03/2018. L'objectiu del PAT és proporcionar a l'alumne informació i assessorament sobre qüestions administratives i acadèmiques definint un tutor que contribueix a facilitar a l'alumne tutoritzat orientació i suport en relació a:
 - Tràmits administratius i ajuts a l'estudi.
 - Normativa Acadèmica General.
 - Acomodació a les instal·lacions de la Universitat. Accés als serveis UB.
 - Contingut del Pla d'Estudis, estructuració del mateix i elecció d'assignatures.

Per assolir aquests objectius en el PAT es defineixen les funcions del tutor:

- Recolzar al coordinador del màster en donar informació als estudiants sobre els tràmits de sol·licitud, d'admissió, matrícula i ajuts a l'estudi, etc.
- En funció de la formació acadèmica prèvia de l'estudiant, donar orientació i suport específics per la seva incorporació al Màster.
- Donar orientació i suport específics sobre l'adequada elecció de les assignatures optatives, i del tema i àmbit de desenvolupament de la Recerca Pràctica i del Treball Fi de Màster, tot això en funció de la seva formació prèvia i de les seves expectatives de recerca, acadèmiques o professionals.

- Seguiment acadèmic, valorant les dificultats i progressió formatives al llarg del seu itinerari curricular.
- Intermediació amb la Comissió de Coordinació de màster i amb el professorat de les assignatures, registrant i transmetent valoracions i propostes dels estudiants.

Els tutors són els membres de la Comissió de Coordinació del Màster i són els que atenen als alumnes de forma personalitzada des de l'inici fins a la finalització del Màster. La tutoria es fa en dues etapes ben diferenciades: la tutoria abans de la matrícula i la tutoria de suport permanent als estudiants ja matriculats. Com fins ara han sigut pocs alumnes, el Coordinador ha fet de tutor de tots ells abans i després de la matrícula però es preveu que es distribueixin entre els membres de la Comissió Coordinadora. Un cop finalitzada la matrícula s'inicia la segona etapa de tutorització en la que el tutor atén les sol·licituds de tutories dels alumnes de forma personalitzada en ocasions a requeriment de l'estudiant i en d'altres a requeriment del tutor. Quan s'assigna un director del TFM al final del primer semestre, aquest fa un seguiment complementari, d'orientació i resolució de problemes de funcionament i gestió al que fa el tutor. Actualment, no es disposa d'evidències sobre el grau de satisfacció de professors i estudiants sobre el PAT i queda pendent recollir aquesta informació mitjançant algun tipus d'enquesta entre el professorat i l'alumnat.

5.2 Els recursos materials disponibles són adequats al nombre d'estudiants i a les característiques de la titulació

La Facultat de Química disposa dels recursos i de les infraestructures adients per afavorir l'aprenentatge de l'estudiant i el bon desenvolupament de la docència dels ensenyaments que s'imparteixen. A la planificació de cada curs el centre té present la necessitat d'espais que requereix cada titulació que s'imparteix i la distribueix segons cada necessitat. Totes les aules estan dotades dels recursos necessaris per al desenvolupament de la docència (pissarra, ordinador amb connexió LAN, projector, etc.). Per a les assignatures que requereixin la utilització d'un ordinador per part de l'alumne, la Facultat disposa de cinc aules d'informàtica amb capacitat per 20 - 30 alumnes. Per a la realització dels treballs experimentals es disposa de diversos laboratoris docents equipats amb el material i la instrumentació apropiats. També els departaments compten amb personal tècnic de suport a la docència experimental que permet mantenir els laboratoris en condicions per la bona realització de les pràctiques.

Els estudiants matriculats a la Universitat de Barcelona poden disposar de tots els recursos que ofereix el [Centre de Recursos per a l'Aprenentatge i la Investigació](#) (CRAI). Aquest centre integra els serveis de biblioteca, suport a la docència i a la investigació. A través del CRAI l'alumne podrà accedir al servei de préstec de fonts pròpies de la UB i a fonts d'altres biblioteques mitjançant el préstec interbibliotecari, a bases de dades subscrites per la UB i també tindrà accés a documents electrònics propis i subscrits. A més, com el CRAI pertany al consorci de les biblioteques de les Universitats Catalanes, l'alumne pot disposar dels recursos d'aquest consorci. La major part dels serveis proporcionats pel CRAI es poden utilitzar en línia, tot i que el CRAI disposa de 17 biblioteques, una de les quals es troba a l'edifici del centre. La [Biblioteca de Física i Química](#) que és considerada com una de les millors biblioteques d'Espanya en el camp de la Química, està dotada de punts d'estudi, de treball i d'autoaprenentatge, tant individuals com col·lectius, dotats dels equipaments informàtics necessaris. També disposa d'un personal amb coneixement i experiència per satisfer les necessitats d'informació, formació, investigació i docència. La utilització dels serveis del CRAI permet també als estudiants l'accés al [Campus Virtual de la UB](#). El campus virtual constitueix una eina tant per al seguiment de l'estudiant com per la comunicació professor - estudiant ja que permet intercanviar material docent, un fàcil accés als plans docents i als programes de les

assignatures, i el lliurament d'activitats d'avaluació per part dels estudiants, entre d'altres aplicacions.

La UB realitza anualment una enquesta per tal de conèixer la satisfacció dels estudiants amb els serveis, les activitats i les instal·lacions d'un centre donat. Els resultats per a la UB en el seu conjunt es poden consultar a la web del Gabinet Tècnic del Rectorat, a l'apartat d'[enquestes de l'alumnat](#). Els resultats dels cursos 2015 i 2016 es recullen a l'Espai VSMA (Biblioteca: [E521A](#) i [E521B](#) ; Préstecs: [E522A](#) i [E522B](#); Visitants/usuaris: [E522C](#) i [E522D](#) ; Formació al CRAI: [E522E](#) ; Aules d'informàtica: [E521C](#) ; Sales d'estudi: [E521D](#) ; Laboratoris: [E521E](#)). És convenient apuntar que en aquesta enquesta de serveis, instal·lacions i activitats, les dades es presenten agregades per tots els ensenyaments del centre, i inclouen respostes d'estudiants de Grau i Màster. Resulta evident que si bé algunes instal·lacions són comunes (CRAI, restaurant, lavabos) altres (laboratoris) no ho són. En aquest sentit, els laboratoris emprats en les titulacions de Grau són completament diferents dels laboratoris en els que, per exemple un estudiant de Màster pot realitzar el seu TFM. S'ha demanat doncs al GTR dades desagregades de l'enquesta de serveis. A més, una altre punt que posa en risc la fiabilitat de les conclusions que es poden extreure d'aquesta enquesta és la baixa participació (tan per estudiants de Grau, i encara més d'estudiants de Màster), el que fa que l'error mostral i la variabilitat dels resultats sigui massa alt i els resultats no siguin gaire representatius. Per exemple, les dades de participació en l'última enquesta van indicar que la participació a la FQ va ser molt baixa (4,7%), encara que més alta que la mitjana a la UB (3,7%). Amb tot, part dels raonaments exposats a continuació es basen en el resultats d'aquesta enquesta.

Les taules comparen, en una escala d'1 a 4, la valoració que es fa del centre amb la mitjana a la Universitat de Barcelona ja que pràcticament totes les instal·lacions i serveis generals es gestionen des de la Facultat. De totes maneres, en cap cas s'observen valoracions inferiors a 2 estant la majoria dels valors compresos entre 2,50 i 3,35 en els dos anys analitzats. Aquests valors indiquen que la majoria dels enquestats es mostren bastants satisfets amb els serveis i instal·lacions del centre. Els valors del centre són molt semblants als obtinguts a nivell global a tota la Universitat de Barcelona, essent en alguns casos lleugerament superiors i en altres lleugerament inferiors. De fet hi ha 4 indicadors que cal revisar i millorar significativament. Aquest són: Disponibilitat de punts de connexió, disponibilitat d'ordinadors, informació i difusió dels serveis del CRAI i les sales de treball en grup. Especialment aquest darrer punt és preocupant perquè els enquestats li donen una valoració baixa en ambdós anys i resulta ser el valor més baix de tota l'enquesta amb només 2,1 en 2016.

La valoració de les **aules** en 2015 recollia 4 indicadors i la valoració global, mentre que en 2016 únicament hi va haver la valoració global de les aules. Tot i que es pot considerar baixa la valoració rebuda per les aules del centre, aquesta és superior a la que reben en mitjana les aules a la UB. La qualitat i adequació del mobiliari han rebut la valoració més baixa, de 2,42. Mentre que l'espai disponible assoleix 2,9. La part vella de l'edifici presenta unes limitacions i es va aplicant manteniment però el cost no ajuda en la seva renovació tot i que cal dir que compleix abastament la seva funció. En aquesta part de l'edifici és la docència de primer curs la que es duu a terme mentre que la resta de cursos fan la docència en la part nova de l'edifici que té un mobiliari més nou i una disposició més actual.

Tal com passa a la valoració de les aules, la de les **aules d'informàtica** també recollia en 2015 4 indicadors i la valoració global, mentre que en 2016 únicament hi va haver la valoració global de les aules d'informàtica. La valoració rebuda per les aules informàtiques del centre és superior a la que reben en mitjana les aules d'informàtica a la UB. La qualitat de les instal·lacions ha rebut la valoració més baixa, 2,54. Mentre que la valoració global en 2015 va ser de 2,87, valor prou satisfactori malgrat que en 2016 va ser menor, de només 2,62.

La valoració de les **sales d'estudi** en 2015 recollia 3 indicadors, mentre que en 2016 únicament hi va haver la valoració global de les sales d'estudi. El què està més ben valorat és l'horari de les sales d'estudi del centre amb un 2,8 en 2015 i el global de les sales d'estudi en el centre en 2016 va tenir un 2,76. En conseqüència també és un punt de reflexió i del qual cal esbrinar el motiu que motiva aquesta valoració.

Pel què fa als laboratoris, la seva valoració també en 2015 recollia 3 indicadors i la valoració global, mentre que en 2016 únicament hi va haver la seva valoració global. La valoració rebuda pels laboratoris del centre és superior a la que reben en mitjana els laboratoris de la UB excepte en el ítem de la qualitat de les instal·lacions que ha rebut la valoració més baixa, 2,36 (2,63 les de mitjana de la UB). Tant en la valoració del 2016 dels laboratoris del centre com en la valoració dels laboratoris mitjana de la UB s'assoleixen valors baixos 2,36 i 2,43, respectivament. En general, els laboratoris ja tenen un manteniment més freqüent degut a la pròpia utilització i necessitat d'estar en bones condicions però els laboratoris docents són els ubicats a la part vella de l'edifici i malgrat que gaudeixen de la seguretat i equipament requerit, l'aspecte està molt allunyat al dels laboratoris que alguns estudiants han gaudit en la formació prèvia.

Tant en 2015 com en 2016 la ocupació de les instal·lacions del CRAI al centre és força gran. Amb la informació que tenim que ho és de centre, es pot afirmar que augmenta el nombre de préstecs en quasi bé un 80% el 2016 pels estudiants de 1r i 2n cicle. Ara bé es detecta una baixada en el nombre de matriculats als **cursos de formació** impartits per l'ICE

A les taules de l'Espai VSMA [E522A](#) [E522B](#) i [E522C](#) [E522D](#) i [E522E](#) es presenten dades d'usos i de formació de la biblioteca del centre comparades amb el total de les biblioteques de la UB. Considerant que el centre representa aproximadament un cinc per cent del total de la UB, es pot veure que el nombre de visitants i de préstec de bibliografia recomanada és superior a la mitjana, indicant l'ús que els estudiants del centre en fan és significatiu.

En el cas concret del Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica convé afegir que a més de les aules de docència i informàtiques de la Facultat de Química, aquest màster ha fet servir aules de docència A26P i A27P i l'aula d'ordinadors V13P destinada als estudis de Máster de la Facultat de Física de la UB.

Adicionalment, algunes classes del màster s'han desenvolupat en les instal·lacions del Campus Nord de la UPC, en particular es disposen de les aules d'informàtica de la Facultat d'Informàtica de Barcelona (FIB) que han sigut utilitzades per impartir diferents assignatures de pràctiques d'ordinador. En particular, s'han utilitzat 3 aules amb ordinadors molt potents (windows/linux i MacOSX) adquirits recentment, que han estat molt convenients per a la docència d'algunes assignatures de computació. També es disposen en el mateix campus de diferents aularis per a docència, una aula d'informàtica i dues sales amb ordinadors d'ús general. Els alumnes del màster també tenen accés a la biblioteca Rector Gabriel Ferrater (<https://biblioteca.upc.edu/brgf>) i a les aules d'estudi del Campus Nord(<https://www.upc.edu/campusnord/ca/serveis/aules-destudi-a4>).

Finalment, cal remarcar que els alumnes han tingut accés als espais, equipaments informàtics i software científic que disposa l'Institut de Química Teòrica i Computacional de la UB (que inclou grups dels Departaments de Ciència de Materials i Química Física, Química Inorgànica i Orgànica de la Facultat de Química), els Departament de la Matèria Condensada de de la Facultat de Física de la UB amb accés en algunes assignatures Barcelona Supercomputing Centre (BSC) per utilitzar certes aplicacions. Per altra banda, la col·laboració amb el BSC ha permès realitzar algunes pràctiques de càlcul paral·lel massiu d'assignatures de programació gràcies a l'accés que ens han ofert a les màquines que disposen.

Estàndard 6: Qualitat dels resultats dels programes formatius

Política Docent de la Facultat de Química

En el document Política de Qualitat, Medi ambient i Seguretat, aprovat per la Junta de Facultat el 04/11/2014 s'explicita que la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona, gestionant adequadament els recursos humans i materials de què disposa, vol dur a terme, amb la màxima eficàcia i eficiència, la seva tasca de formar professionals tècnicament competents en els àmbits de la química, de l'enginyeria química i de l'enginyeria de materials, èticament responsables, amb el compromís de preservar el medi ambient i amb la capacitat de garantir la salut i la seguretat de les persones en els seus àmbits d'actuació.

a) Model docent als màsters de la Facultat de Química

Pels ensenyaments de màster de la Facultat de Química no s'ha desenvolupat un model docent tan homogeni com en el cas dels graus, el que ha permès tenir la flexibilitat necessària per donar característiques pròpies a cada ensenyament. Els aspectes essencials del model relatius a la metodologia docent, l'avaluació i el treball final de màster són comuns a tots els ensenyaments de màster. Es descriuen els aspectes relatius al Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica en les comentaris al subestàndard 6.1.

b) Selecció d'assignatures.

La selecció d'assignatures s'ha fet d'acord amb els criteris de pertinència a matèries diferents representatives de les grans àrees del currículum amb les diverses tipologies d'assignatures com són les teòriques, experimentals o d'altres tipus.

Taula 3.8. Assignatures del Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica escollides

<p>Introducció a la Computació Científica</p> <p>Pla docent</p>	<p>Matèria obligatòria: Elements de Matemàtica Aplicada i Informàtica</p> <p>1er SEM</p>
<p>Modelització en la Multiescala</p> <p>Pla docent</p>	<p>Matèria obligatòria: Modelització en la Multiescala</p> <p>1er SEM</p>
<p>Treball Final de Màster</p> <p>Pla docent</p>	<p>Matèria obligatòria: Treball Final de Màster</p> <p>2n SEM</p>

c) Execucions dels estudiants

A l'enllaç següent es poden consultar exemples seleccionats de les evidències de les proves d'avaluació en el marc de les assignatures seleccionades i del TFG/TFM, tal com es requereix a la guia per a l'acreditació de les titulacions d'AQU-Catalunya. El conjunt total de les mostres d'execucions dels estudiants també estaran a disposició del CAE en format paper.

[Mostres de les execucions dels estudiants](#)

6.1. Les activitats de formació són coherents amb els resultants d'aprenentatge pretesos que corresponen al nivell del MECES adequat per a la titulació

L'objectiu formatiu específic del màster se centra en adquirir la formació interdisciplinària necessària, tant teòrica (fonaments físics i matemàtics) com pràctica (programació, computació, implementació, etc.), per dur a terme recerca i desenvolupament en el camp de la modelització computacional atòmica i multiescala, en diferents problemes físics, químics i bioquímics. Per tal d'assolir aquest objectiu, les activitats de formació programades estan pensades per ampliar el coneixements de programació, desenvolupament d'eines informàtiques i aplicació dels codis més generals d'ús comú en la modelització de sistemes materials i els seus processos així com assolir un coneixement profund dels conceptes de modelització atòmica a diferents escales de mida i de temps en un context d'investigació que permeti aplicar-los de manera flexible i original als sistemes/proprietats/processos d'interès. En aquest sentit s'ajusten tant els continguts com els objectius formatius al nivell de màster definit en el MECES i establert en la memòria de verificació.

Amb caràcter general, la metodologia utilitzada en aquest màster es concreta en activitats teòrico-pràctiques consistentes a facilitar l'adquisició de coneixements específics a través de classes magistrals, combinades amb la resolució de casos. Una altra metodologia emprada són les pràctiques de laboratori computacional que permeten als alumnes aplicar i configurar, a nivell pràctic, la teoria en un context concret per resoldre problemes de modelització computacional que requereixen l'ús de paquets informàtics existents o el desenvolupament de noves eines i aplicacions. Amb aquestes metodologies s'assoleixen les competències bàsiques previstes en el màster, ja que s'integra fàcilment el coneixement i a la vegada permet desenvolupar les competències generals i transversals proposades. Pel que fa l'assoliment del nivell adequat en llengua anglesa, cal destacar que tots els alumnes admesos al màster han d'acreditar que tenen el nivell B2 (o equivalent) d'anglès i han de fer-lo servir tant per seguir les classes com per elaborar, redactar i defensar el TFM.

Tot i la diversitat formativa en la procedència dels alumnes matriculats fins ara (graus de física, química, bioquímica, enginyeria física i enginyeria química), els continguts i la metodologia formativa emprada han permès assolir un grau satisfactori d'assoliment de les competències per part dels estudiants. No obstant això, aquesta heterogeneïtat en el grup classe és una de les principals motivacions per a la millora continuada de les activitats formatives i la metodologia docent que tregui el màxim profit de cadascuna d'aquestes experiències prèvies, incidint en les mancances mitjançant grups tutoritzats en les assignatures obligatòries, per assolir una formació i un nivell d'aprenentatges òptims fent servir un sistema d'avaluació comú i homogeni.

[Taula 3.6.1 \(E.6.1\). Competències de les assignatures seleccionades del Màster en Modelització Computacional Atòmica i Multiescala en Física, Química i Bioquímica](#)

[Taula 3.6.2 \(E.6.2\). Activitats formatives de les assignatures seleccionades](#)

Assignatures objecte d'avaluació específica:

Les assignatures escollides són representatives del currículum del Màster ja que una es correspon a un tipus teòric, **Modelització en la Multiescala**, i l'altra és més de tipus aplicat, **Introducció a la Computació Científica**. Finalment, s'ha d'incloure el **TFM** per la seva importància formativa i les seves especificitats. Aquestes assignatures obligatòries es desenvolupen durant el primer semestre i formen part de dues matèries diferents (Modelització en la Multiescala i Elements de Matemàtica Aplicada i Informàtica), que tenen els següents objectius formatius descrits en la memòria de verificació,

Modelització en la Multiescala:

- Conèixer les diferents escales de longitud i temps en què succeeixen els processos físics, químics i bioquímics objecte del present màster, des dels fenòmens a escala atòmic-molecular fins als que tenen lloc a nivell macroscòpic.
- Conèixer les diferents teories físicomatemàtiques de descripció dels fenòmens físics, químics i bioquímics, en les diferents escales de longitud i temps considerades.
- Saber relacionar les diferents magnituds fisicoquímiques, pròpies de cada escala, amb les de les altres escales de descripció. En particular, les relacions estructura-propietat, típiques de les relacions entre l'escala macroscòpica i la microscòpica.
- Saber buscar i organitzar la informació relacionada amb la matèria en les fonts primàries i secundàries.
- Familiarització amb diferents casos particulars de descripció a diferents escales de longitud i temps.
- Saber resoldre problemes pràctics de l'aplicació de les teories físic-matemàtiques estudiades, així com de les magnituds i unitats utilitzades en cada cas.

Introducció a la Computació Científica:

- Saber interpolar i aproximar funcions i dades numèriques.
- Saber realitzar càlculs numèrics d'integrals i derivades de funcions.
- Resoldre numèricament equacions i sistemes d'equacions diferencials ordinàries.
- Resoldre, sabent triar el mètode més adequat, sistemes lineals d'equacions.
- Resoldre equacions i sistemes d'equacions no lineals.
- Calcular, sabent triar el mètode més adequat, els valors propis d'una matriu quadrada.
- Modelitzar i resoldre matemàticament problemes científic-tècnics bàsics.
- Saber tractar numèricament tipus comuns d'equacions diferencials en derivades parcials.
- Saber aplicar els mètodes d'optimització comuns.
- Adquirir el suficient maneig amb l'ordinador com per a realitzar les competències anteriors de forma ràpida i eficaç amb la seva ajuda i la del programari matemàtic adequat.

L'assignatura de **Modelització en la Multiescala** és una activitat d'aprenentatge obligatòria en el programa en la que s'introdueixen els aspectes bàsics de la física i de la química en que es fonamenta la modelització dels sistemes materials a diferents escales de grandària (numero de partícules, extensió) i de temps (vida dels processos, promitjos temporals). En aquesta assignatura es treballen pràcticament totes les competències bàsiques (CB6, CB7, CB8, CB9 i CB10), generals (CG1, CG2, CG3, CG5 i CG6) i transversals (CT1, CT2, CT3, CT4 i CT5) del Màster. També es treballen algunes competències específiques relatives a les escales de temps i grandària (CE6, CE7, CE8, CE9, CE10, CE11, CE12, CE13, i CE14), que s'acabaran d'assolir i consolidar amb els desenvolupaments i aplicacions que es fan en altres assignatures obligatòries i optatives. Aquesta assignatura teòrica consta de 5 capítols que imparteixen conjuntament dos professors que es reparteixen el temari en el qual tenen una llarga experiència. Després d'una introducció general de l'assignatura, s'introdueixen les teories bàsiques per descriure els sistemes en equilibri i les interrelacions entre el món microscòpic i el macroscòpic. Seguidament, s'apliquen aquestes teories a sistemes concrets per establir els aspectes més importants de la modelització de sistemes/propietats/processos físic-químics des de la seva estructura atòmica-molecular en materials, macromolècules i biopolímers, nanopartícules i col·loides, etc. Seguidament es fa un tractament dels fenòmens de transport i reactivitat química mitjançant la termodinàmica de processos irreversibles i la mecànica estadística de sistemes fora de l'equilibri per abordar els sistemes complexos que, en gran mesura, és l'objectiu final de la modelització multiescala.

De cada tema es donen una sèrie de classes magistrals que els alumnes han de seguir i van realitzant exercicis tutoritzats així com també exercicis entregables per a la seva avaluació continuada (part pràctica). Els problemes plantejats per la seva resolució es corregeixen de forma individual encara que s'admet que siguin discutits i resolts en grup. Per a això, es valora la discussió i presentació del desenvolupament del problema i la discussió dels resultats.

Durant els curss es fan 3 proves escrites (part teòrica) consistents en un conjunt teoricopràctics, on l'alumne pot disposar de tot el material donat en el curs i accés per ordinador a internet i en el qual es valora la capacitat de síntesi i desenvolupament de les diferents qüestions que es formulen, de manera que no cal saber-se de memòria les equacions i deduccions, sinó que sàpiguen aplicar els diferents conceptes teòrics als problemes plantejats i sobretot que sàpiguen discutir tant el resultat obtingut com les hipòtesis del model utilitzat.

Finalment, l'avaluació per examen permet determinar el grau d'adquisició de coneixements i el grau de capacitat d'anàlisi i de resolució dels problemes plantejats per a les diferents tècniques de caracterització.

Amb tot això les diferents activitats, resolució de problemes a l'aula, resolució de problemes entregables i exàmens, mostren ser adients i coherents amb els resultats d'aprenentatge que es marquen com a objectiu en l'assignatura.

L'assignatura **d'Introducció a la Computació Científica** és una activitat d'aprenentatge obligatòria teòric-pràctica de tipus computacional que es desenvolupa a l'aula d'ordinadors. Els alumnes han d'adquirir els coneixements bàsics per poder programar diferents algorismes i aprendre a desenvolupar i perfeccionar aquests per finalitats científiques de la modelització computacional atòmica i multiescala en diferents camps de la física, la química i la bioquímica. L'assignatura és de 6 ECTS i es desenvolupa des del mes d'octubre fins la primera meitat del mes de gener, en tres sessions setmanals de dues hores cada una. Cada sessió consisteix en dos parts. En aquesta assignatura es treballen algunes de les competències bàsiques (CB6, CB7, CB8, i CB10), generals (CG2, CG5 i CG6) i transversals (CT1 i CT4) del Màster. Tanmateix es treballen algunes competències específiques relatives a la programació i algorísmia (CE1, CE2, CE3, CE4 i CE5) que s'acabaran d'assolir i consolidar amb els desenvolupaments i aplicacions que es fan en altres assignatures obligatòries i optatives.

Pel que fa el desenvolupament de l'assignatura, durant la primera part de cada sessió (dura entre 30 minuts i una hora) s'expliquen els fonaments teòrics que es desenvolupen durant la resta de temps de la sessió en què es fan problemes i exercicis relacionats amb la teoria que s'ha explicat durant la primera part. Aquests consisteixen en escriure un codi de programa, que correspon a un tipus d'algorisme explicat i és necessari per resoldre el problema. El llenguatge que es fa servir per escriure aquests programes és el FORTRAN o el Python.

Els exercicis i problemes proposats s'han d'entregar tot i aquestes entregues formen part de l'avaluació final de l'alumne. A mitjans de curs s'assigna a cada alumne el treball anomenat treball final de pòster. Aquest treball completament individualitzat, l'ha d'anar realitzant l'alumne des d'aquell moment. Aquests treballs s'exposen el darrer dia del curs en forma de pòster, l'alumne explica el seu treball i el defensa amb preguntes i qüestions que els professor li formulen. Aquesta exposició té lloc al hall de l'entrada de les Facultats de Física i de Química i els pòsters estan exposats al públic durant una setmana. Els treballs entregats corresponents a un tema, consisteixen en resoldre un problema o exercici mitjançant l'escriptura d'un o varis algorismes. La nota que es posa en cada exercici és funció de l'execució correcte del codi programat i de la inventiva en la seva resolució. Aquest treball i la seva d'exposició representa una forma molt pràctica d'avaluació que fa participar el grup-classe en el conjunt dels treballs i que és molt ben valorada pels estudiants. Pel que respecta al treball final de pòster per la seva avaluació es té present, la presentació, la bibliografia, l'exposició i les respostes a les preguntes formulades durant la seva defensa. L'avaluació de l'assignatura consta d'aquestes dues parts:

els exercicis entregats durant el curs tenen un pes del 30 % sobre la nota total o final mentre que el pòster té el pes restant, és a dir un 70 %.

Pel que fa al **Treball Final de Màster (TFM)** cal tenir en consideració que és una activitat d'aprenentatge fonamental en el programa. Ofereix a l'alumnat l'oportunitat d'aprofundir en l'estudi d'un tema del seu interès, i al mateix temps li permet desenvolupar les competències i habilitats tals com la capacitat de planificar un procés, resoldre problemes, analitzar i interpretar resultats, o defensar propostes mitjançant una comunicació eficient. És un treball acadèmic d'introducció a la recerca que es desenvolupa dins d'un grup de recerca amb investigadors actius amb experiència demostrada en diferents camps de la modelització computacional. El TFM consisteix en la planificació, realització, presentació i defensa d'un projecte o treball de recerca, teòrica o aplicada, sobre un àrea específica de treball. La seva finalitat és propiciar l'aplicació de les destreses i els coneixements adquirits en la resta de les matèries del Màster, així com facilitar el desenvolupament de competències rellevants. El TFM es realitza sota la direcció d'un tutor, la funció del qual és orientar i ajudar a l'alumne en cada una de les fases de la seva realització. Tot aquest procés ve regulat per la normativa marc de la Universitat de Barcelona ([normes reguladores del TFM de la Universitat de Barcelona](#)) i desenvolupada per la Facultat de Química ([normes reguladores del TFM de la Facultat de Química](#)). Seguint el Pla d'Acció Tutorial ([PAT](#)) del Màster, l'alumne té assignat un tutor (fins ara el coordinador del màster) que informa sobre el procediment d'elecció del tema del TFM. Al mateix temps, a finals del primer semestre els alumnes són rebuts pel coordinador del màster que de nou informa de les diferents possibilitats per tal d'ajudar a l'alumne a definir l'àmbit temàtic. Tota aquesta informació l'alumne la troba al web del Màster. ([informació TFM en el web del Màster](#)).

El TFM és una assignatura obligatòria que s'ha d'iniciar i concloure durant el segon semestre i el procediment d'assignació de projectes de TFM previst consta de tres etapes:

- 1) proposta de projectes per part dels directors/tutors interessats en dirigir un estudiant (o més) omplint la fitxa de dues planes on descriu la vostra proposta de projecte de TFM. Les fitxes de les propostes de projectes de TFM es fan públiques;
- 2) concreció de les assignacions alumne-director/projecte;
- 3) publicació de la llista d'assignació dels projectes de TFM als estudiants del curs.

Des de la comissió coordinadora es fomenta que aquest procés d'associació alumne-director/projecte sigui espontani i si ja han acordat amb un alumne dirigir el seu TFM la comissió li assigna el projecte que proposat. Si el director del projecte no és un professor del màster se li assigna un tutor per fer un seguiment dels aspectes més formals i administratius.

Cada proposta de projecte de TFM s'ha de presentar en una fitxa (model adjunt) que hauria de descriure de forma breu i entenedora el projecte a desenvolupar per l'estudiant, amb una previsió de les tasques i la dedicació aproximada per completar-les (cronograma). L'apartat "Breu descripció del projecte" ha de ser concisa, posar en context el treball que es vol desenvolupar i els objectius del projecte, incloent els formatius (p. ex.: desenvolupament de codi, programació, scripting, paquets de càlcul i gràfics, ...). Es recomana incloure algunes referències rellevants (3-6) per poder situar l'àmbit dels estudis proposats (estudis previs, antecedents,...). Aquestes fitxes amb els projectes de TFM es faran públiques a la web i serviran de guia per l'estudiant i per fer l'avaluació del treball per part del tribunal corresponent.

El [Pla docent del TFM](#) recull totes les competències del Màster donat que en l'elaboració, presentació i defensa del TFM els estudiants apliquen tots els coneixements adquirits en la resta d'assignatures del seu itinerari curricular. Pel que fa als resultats de l'aprenentatge, també indicats en el Pla docent i que es corresponen amb els de la Memòria de verificació,

- Adquirir versatilitat en l'aplicació intel·ligent dels coneixements teòrics i informàtics apresos a la resolució d'un tema determinat.
- Identificació, organització, planificació i presentació de les etapes del procés de modelització i dels resultats rellevants.
- Interpretar i correlacionar l'estructura dels sistemes materials i les seves propietats.
- Conèixer els límits d'aplicabilitat en termes d'escala de temps i d'espai, així com dels resultats obtinguts mitjançant les diferents tècniques de modelització a la multiescala.
- Defensa sòlida dels punts de vista personals basant-se en coneixements científics ben fonamentats en les aproximacions i en els mètodes de càlcul utilitzats.
- Destresa en l'elaboració d'informes científics complexos, ben estructurats i ben redactats així com en la presentació oral del treball, utilitzant els mitjans habituals.
- Preparació per a desenvolupar una activitat investigadora. es posen de manifest en les diferents etapes del desenvolupament del TFM.

El TFM es realitza en el grups de recerca que tinguin una activitat de recerca relacionada amb la modelització computacional i és l'alumne qui en fa l'elecció a partir de la informació rebuda. Un cop ha escollit ho comunica a la coordinadora del Màster que demana al tutor del TFM la seva acceptació. Posteriorment la Comissió Coordinadora del Màster és la que dóna el vist i plau als temes i tutors dels diferents TFM. Quan el TFM s'ha realitzat en algun grup de recerca fora de la Facultat de Química s'ha demanat una breu descripció del tema, així com els objectius i la planificació del treball ([Projecte TFM](#)). Aquesta proposta es passa a la Comissió Coordinadora que és qui l'aprova.

Un cop l'estudiant s'incorpora al grup de recerca es combina el treball tutelat i el treball autònom de l'alumne. La fase d'elaboració del treball està directament relacionada amb les competències relacionades amb l'aplicació dels coneixements adquirits, i capacitat de resolució de problemes que els permetin enfrontar-se a situacions noves i complexes així com la capacitat de treball en equip i d'adaptació a equips multidisciplinaris (CB6, CB7, CB8, CB10, CG1, CG2, CG3, CG5, CT1, CT2, CT3, CT4, CT5, CT7, CT8, CT9). En la fase de presentació de la memòria i defensa pública del treball prenen protagonisme les competències relacionades amb les seves capacitats de comunicació tant escrita com oral (CB9, CB10, CG4, CT6). Les competències s'assoleixen de forma diferent en funció del tipus de Treball Final de Màster que es realitza que pot tenir un caràcter més de desenvolupament, programació o aplicació de paquets de càlcul a problemes concrets que corresponen a algunes de les competències específiques que caracteritzin aquest aspecte (CE1, CE2, CE6, CE13, CE14, CE15).

6.2. Les activitats formatives, la metodologia docent i el sistema d'avaluació són adequats i pertinents per garantir l'assoliment dels resultats d'aprenentatge previstos.

Model docent

El model docent desenvolupat per implementar els estudis d'aquest títol de màster ha permès tenir la flexibilitat necessària per donar cabuda a les característiques diverses d'uns continguts teòrico-pràctics interdisciplinaris que caracteritzen la modelització computacional. Els aspectes essencials del model s'han descrit més amunt

- a) **Metodologia docent.** La planificació docent es basa en el crèdits ECTS i es programen activitats formatives similars, amb classes de teoria, problemes pràctiques d'ordinador o de laboratori. No hi ha semestralització i l'ensenyament té una programació de caràcter anual. En el cas d'assignatures optatives es manté una oferta moderada per tal d'evitar la dispersió dels estudiants. Tanmateix, com a norma general, quan la demanda d'una assignatura optativa és inferior a tres alumnes l'assignatura s'anul·la i els estudiants afectats són reubicats en assignatures de major demanda.

- b) **Avaluació.** En aplicació de la normativa de la UB l'avaluació es caracteritza pels mateixos trets essencials que en els graus. Tots els estudiants estan, per defecte, en règim d'avaluació continuada, excepte aquells que sol·licitin formalment el d'avaluació única. En aquest darrer cas, tot i que és un dret a disposició dels estudiants, i es preveu en el pla docent, és una pràctica realment excepcional en els ensenyaments de màster. Els instruments d'avaluació de cada assignatura estan detallats al seu pla docent.
- c) **Treball Final de Màster.** El TFM és de 18 crèdits ECTS i consisteix en el desenvolupament d'un projecte durant el segon semestre que l'estudiant pot dur a terme a les instal·lacions del centre o en un organisme extern amb la supervisió d'un tutor que ha de ser professor del màster. Aquest projecte consisteix en desenvolupar i/o aplicar algun tipus d'esquema de modelització computacional a un determinat sistema físico-químic per analitzar la seva estructura, una determinada propietat o bé un procés que hi tingui lloc. La [Normativa del TFM de la Facultat](#) proporciona el marc comú, per bé que cada màster disposa de les seves directrius que regule les seves particularitats que s'especifica en el corresponent pla docent. La Comissió coordinadora del màster és l'encarregada de fer l'oferta de treballs, d'establir el mecanisme d'assignació als estudiants, els terminis de dipòsit i les dates per a la defensa pública dels treballs. Els models d'avaluació inclou la defensa davant d'un tribunal constituït per tres professors, algun dels quals pot ser extern a l'ensenyament. En la majoria dels casos també s'inclou la valoració del tutor del treball, i tant el tutor com el tribunal disposen d'una rúbrica que permet la valoració de les competències associades. D'altra banda també s'ha començat a fer la publicació a la memòria completa a través del [Dipòsit Digital](#) de la UB pels casos amb millors qualificacions, si bé encara no és una pràctica estesa a tots els ensenyaments de màster.

El llistat de competències treballades en cadascuna de les assignatures del màster s'ajusta al que s'indica a la memòria de verificació del títol. En l'assignació de les competències definides per a les matèries optatives que es desglossen en més d'una assignatura s'ha intentat avaluar les competències específiques pertinents en més d'una d'elles per tal d'assegurar que els alumnes l'assoleixin satisfactòriament així com aprofundir en l'assoliment i d'alguna de les competències transversals i generals.

Les activitats formatives, la metodologia docent i el sistema d'avaluació de cada assignatura estan inclosos al pla docent de cadascuna, que és públic prèviament a la matrícula dels estudiants. Les activitats formatives i la metodologia docent emprades per desenvolupar totes les assignatures s'ajusten a les proposades en la memòria de verificació i s'ha demostrat que són adequades per assolir els objectius formatius previstos tenint en compte l'heterogeneïtat del grup classe donada la diversitat formativa en la procedència dels alumnes matriculats fins ara. Pel que fa els sistemes d'avaluació de cadascuna de les assignatures, s'ha intentat ajustar a cada tipus de temàtica (teòrica, teòrico-pràctica i pràctica) de forma que cada alumne parteixi d'un nivell formatiu donat pels seus estudis de grau i s'avaluï l'assoliment de coneixements tenint en compte la seva progressió al llarg del curs, evitant al màxim l'abandonament per part dels estudiants que parteixen amb una formació limitada en un determinat àmbit. En aquest sentit s'ha aconseguit que hi hagi una taxa de rendiment molt alta en la majoria de les assignatures com queda palès a la Taula 6.1.

[Taula 3.6.3 Qualificacions de les assignatures \(E.6.5 i E.6.9 del VSMA\)](#)

Les activitats formatives són majoritàriament activitats teòriques on la metodologia seguida són classes magistrals i participatives per les assignatures de caire teòric que, depenent de cada assignatura, també s'inclouen classes de problemes pràctics. Pel que fa les assignatures teòrico-pràctiques o pràctiques, les activitats són majoritàriament sessions demostratives amb ordinadors, pràctiques amb ordinadors, realització i exposició de treballs tutelats (individuals o

en grups), i alguns seminaris d'investigadors especialistes. Totes aquestes activitats es fan a les instal·lacions (aules de pissarra i aules d'ordinadors) de les Facultats de Química i de Física de la UB i a les aules d'informàtica de la UPC del campus nord (Facultat d'Informàtica de la UPC (FIB)). El desenvolupament d'aquestes activitats formatives permet assolir les competències transversals i generals, així com facilitar la futura inserció laboral.

Els criteris d'avaluació estan recollits en els plans docents de les assignatures que es fan públic en el web del màster i es comenten el primer dia de classe. De forma general els estudiants s'acullen a l'avaluació continuada i els mètodes d'avaluació semblen idonis per motivar l'estudi dels continguts i l'assoliment de les competències pròpies del màster. L'anàlisi dels resultats acadèmics de les assignatures és satisfactori amb una mitjana situada en el notable, generalment alt. La taxa d'èxit de les assignatures del màster és molt elevada, superior al 90%. Tanmateix, cal destacar que s'ha revistat la rúbrica d'avaluació del TFM per homogeneïtzar els criteris de les diferents comissions avaluadores, valorant especialment les competències bàsiques i transversals.

Un cas especial és la realització del TFM pel que respecta les activitats formatives i la metodologia docent. Aquest es realitza en el grup de recerca del directors del TFM, que generalment és un professor del màster que li assigna la Comissió Coordinadora. La gran majoria dels treballs es realitzen en grups de recerca de la Facultat de Química i la Facultat de Física de la UB i en menor mesura, en grups dels departaments de la UPC que participen en la docència del màster. Així mateix, és important destacar la possibilitat que l'alumne s'hi incorpori a un grup de fora de la UB, ja sigui en universitats de l'entorn de Barcelona (UAB) o en centres de recerca d el CSIC (ICMAB, IQAC,...). En aquest cas, els alumnes han de tenir un professor de la UB com a tutor per fer el seguiment i ajudar-lo en aspectes administratius i de gestió.

Taula 3.8 Distribució dels TFM dels estudiants del màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica

TFM	2015-16	2016-17	2017-18
TFM totals	6	12	9
TFM a la Facultat de Química UB	2	6	5
TFM a la Facultat de Física UB	3	5	2
TFM a departaments de la UPC	1	1	1
TFM en centres externs de recerca	0	0	1
TFM en empreses	0	0	0

Font: Centre (Facultat de Química)

Finalment, un altre element valoratiu d'aquest apartat l'aporten les enquestes de satisfacció del professorat amb el desplegament de l'ensenyament ([Taula E.6.6 del VSMA](#)). Les enquestes sobre la satisfacció del professorat son francament positives, donant una puntuació de 5,0 sobre 6 a la satisfacció global amb la titulació. Dels aspectes avaluats en l'enquesta de professorat destaquen com a aspectes millor valorats els sistemes d'avaluació emprats les assignatures impartides (5,4 sobre 6) i del TFM (5,2 sobre 6) mentre que els aspectes pitjor valorats corresponen a la coordinació amb la resta de docents de la titulació (4,1 sobre 6) i el treball i la dedicació dels estudiants (4,3 sobre 6). D'aquests valors es conclou que el professorat del màster està satisfet amb el màster i que se sent fortament implicat amb el seu

funcionament, fet que valorem molt positivament ja que és un ingredient essencial per poder millorar de manera efectiva les disfuncions que es puguin observar i mantenir un bon nivell de la formació que s'ofereix en el màster.

6.3. Els valors dels indicadors acadèmics són adequats per a les característiques de la titulació.

A la taula 3.9 es resumeixen els indicadors de rendiment acadèmic del Màster i s'evidencia que s'ajusta el perfil d'ingrés a la formació bàsica requerida als estudiants matriculats per poder seguir i aprofitar la formació que ofereix aquest títol de màster. Juntament amb les dades dels indicadors de les qualificacions de les assignatures ([Taula E.6.9 del VSMA](#)), aquests valors posen de manifest que l'heterogeneïtat del grup classe és una dificultat que es pot superar amb la metodologia docent escaient i proposant una versatilitat en el desenvolupament dels continguts que permeti aprofitar les virtuts i millorar les febleses de cada alumne en funció de la seva formació bàsica parteixi, això sí, d'uns mínims comuns essencials imprescindibles que s'han d'assegurar amb l'exigència de que l'expedient acadèmic dels alumnes matriculats s'ajustin al perfil d'ingrés com s'ha fet fins ara.

Taula 3.9 Indicadors de rendiment acadèmic del Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.

Indicador	2015-2016	2016-2017	2017-2018
Taxa de rendiment	100%	100%	86.61%
Taxa d'eficiència	100%	100%	100%
Durada mitjana dels estudis	1 curs	1 curs	1 curs
Taxa d'abandonament	0%	0%	0%
Taxa de graduació	100%	100%	100%

Font: *Taula E.6.7 del VSMA i coordinador*

El rendiment acadèmic global del màster és molt positiu tot i que s'observa un lleuger increment dels alumnes que no es presenten a l'avaluació o no abandonen algunes assignatures (veure [Taula E.6.9 del VSMA](#)). Considerem que aquest increment està associat en gran mesura a la incorporació d'alumnes que intenten compaginar els estudis de màster amb una feina a temps parcial o complet. Donat que és un màster exigent en continguts i que requereix una dedicació intensa en les assignatures pràctiques, els alumnes que no tenen una dedicació completa als estudis han de programar amb cura les assignatures que es matriculen i en aquest punt la tutorització juga un paper molt important que s'està millorant fent un seguiment més proper dels alumnes que es troben en aquesta situació. En qualsevol cas, la selecció del perfil d'accés juga un paper molt important que és el factor determinant de l'èxit en la realització d'aquests estudis de màster. És aquest un aspecte que la Comissió Coordinadora té molt en compte a l'hora d'analitzar l'expedient i el currículum de les sol·licituds per accedir al màster.

Un altre dels indicadors que es poden considerar ve donat per la valoració dels estudiants de les assignatures del màster ([Taula E.6.5 VSMA](#)). Tot i oferir una informació limitada d'un

nombre reduït d'assignatures pel baix numero d'enquestes recollides, aquestes dades ofereixen un element de valoració important del grau de satisfacció dels estudiants sobre molts aspectes del màster. Val a dir que la valoració dels estudiants és, en general, positiva, destacant com a molt positiva la valoració del professorat (8,0 sobre 10) i les activitats d'avaluació (7,5 sobre 10). En algunes assignatures remarquen les mancances en les activitats formatives i el material d'estudi que s'intenten corregir d'un curs a l'altre amb els professors responsables d'aquestes assignatures. Per altra banda, cal remarcar el fet de disposar d'aquestes dades sobre el major nombre possible d'assignatures i amb el major nombre possible de respostes per fer-les estadísticament significatives ens aporta una eina important d'anàlisi de resultats que ens permet detectar els aspectes a millorar en el funcionament del màster. Tot i el baix nombre d'enquestes, cal remarcar que la participació ha superat el 50% de matriculats en totes aquestes assignatures, valor superior a la mitjana de participació dels alumnes de màster de la UB, que és del 35%. Tot i així, fomentar la participació en les enquestes és un objectiu general dels graus i màsters que s'imparteixen a la Facultat de Química per obtenir informació acurada i estadísticament significativa i per aquest motiu s'han posat en marxa diferents accions i propostes de millora per incrementar la participació dels estudiants en les enquestes, tant a nivell de cada titulació com a nivell de centre.

En aquest punt convé aportar la informació que es recull en un informe que resumeix les opinions dels estudiants del curs actual (2018-19) que discuteixen en una taula rodona sobre diferents aspectes concrets de funcionament, gestió i continguts del màster que l'AQU els proposa en un document de treball. Aquest informe fa una valoració global molt positiva dels estudis de màster que estan cursant i destaquen el nivell formatiu que adquireixen, sobre tot per la formació en la recerca. Consideren que els continguts donen una formació molt enriquidora que cobreix una demanda que no s'ofereix en cap altre màster de l'entorn i que s'hauria de seguir impartint amb el mateix esperit. També destaquen alguns aspectes de funcionament/organització que consideren que caldria millorar com millorar la coordinació entre la UB i la UPC en alguns temes de gestió, mantenir actualitzada la informació que s'ofereix a la web del màster (en particular, la relativa a les línies de recerca i els grups on puguin fer el TFM), reduir la càrrega docent d'algunes assignatures optatives impartides per més d'un professor millorant la cohesió del temari i el sistema d'avaluació, millorar l'equipament informàtic que fan servir en algunes assignatures o replantejar els crèdits i el format de la memòria del TFM.

La comissió de Coordinació ha analitzat aquest informe i les seves propostes de millora i considera que ja s'estan duent a terme algunes d'elles (millorar la coordinació entre professors d'una assignatura per unificar l'avaluació i reduir la càrrega docent del alumnes, mantenir actualitzat el web del màster i ampliar la informació dels grups de recerca i les seves línies d'investigació) i d'altres que es consideren com a propostes en el pla de millores. En relació al TFM, considerem que el nombre de crèdits és apropiat per mantenir un balanç entre continguts teòrics i el treball d'introducció a la recerca i la rigidesa en el format és justament un requisit per donar assolir una sèrie de competències que es treballen en la realització del TFM. Pel que fa la flexibilitat a l'hora del dipòsit i la defensa, la normativa actual està condicionada per aspectes administratius per poder tancar els expedients durant el mes de juliol però que la comissió de coordinació tornarà a analitzar de cara als propers cursos.

6.4. Els valors dels indicadors d'inserció laboral són adequats per a les característiques de la titulació.

Tot i què encara no es disposa d'enquestes institucionals d'inserció laboral per aquests estudis de màster, la Comissió de Coordinació ha fet un estudi entre els estudiants egresats durant els tres primers cursos i el 100% dels titulats del curs 2015-16 estan fent el doctorat amb beca o contracte de recerca a la UB i a la UPC. Dels titulats el curs 2016-17, un 70% han iniciat els estudis de doctorat a la UB, l'EHU (San Sebastià), a dues universitats europees (U. de Bath (UK), Forschungszentrum Jülich (Alemanya)) i a l'ICIQ (Tarragona). Tots ells estan desenvolupant la recerca en àmbits relacionats amb la temàtica del màster. Per tant, el gruix d'egresats té un perfil essencialment investigador i continua la seva formació acadèmica seguint uns estudis de doctorat afins a la temàtica del màster com s'ha justificat a la memòria de verificació. Pel que fa als egresats que no segueixen amb uns estudis de doctorat no tenen un perfil tan definit però els alumnes amb els quals hem contactat destaquen que la formació rebuda en informàtica i programació ha sigut important a l'hora d'accedir a la seva feina actual. Tal i com s'indica en el pla de millores, s'està dissenyant una enquesta dels egresats per disposar d'una informació sistematitzada d'inserció laboral i dels aspectes més valorats en el nostre entorn socioeconòmic de la formació que ofereix el màster.

4. Valoració i proposta de Pla de Millores

El Pla de Millores recull l'estat de les propostes de millora de centre i de totes les titulacions definides en anteriors processos de seguiment i d'acreditació. El Pla de Millores s'actualitza semestralment i la versió actualitzada del document es pot consultar al següent enllaç:

[Pla de Millores de la Facultat de Química](#)

Durant els cursos en els que s'ha impartit el Màster Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica, i atès que l'informe final d'avaluació de la sol·licitud de verificació del títol oficial de l'AQU, va destacar l'elevada coherència del pla d'estudis amb el perfil competencial i els objectius de la titulació, no s'ha realitzat cap modificació substancial en relació a la memòria verificada.

Des de la implantació del Màster (curs 2015-2016), i com a fruit de la continua revisió i avaluació realitzada per la Comissió coordinadora del Màster s'han pogut establir quins son el punts forts i els punts febles de l'ensenyament exposant alguns d'ells en els darrers informes de seguiment del títol (gener 2018) i de centre (gener de 2019).

Com a **punts forts** es poden destacar **l'itinerari curricular del Màster, l'elevada adequació del professorat, el caràcter interdisciplinari del màster, el caràcter multidisciplinari dels estudiants,**

L'oferta formativa del Màster consta de 21 crèdits obligatoris i 21 crèdits d'assignatures optatives. La part obligatòria d'assignatures s'imparteix duran el primer semestre implica l'assoliment d'una base sòlida anivelladora per a tots els estudiants del Màster de coneixements bàsics físic-químics ([Modelització en la Multiescala](#)), informàtica i programació ([Eines Informàtiques](#)), mètodes numèrics ([Introducció a la Computació Científica](#)) i de les eines i aproximacions bàsiques emprades en el camp de la modelització molecular ([Modelització Molecular](#)). Aquests coneixements bàsics es complementen amb tres assignatures optatives de caràcter anivellador que es recomanen segons els estudis de procedència dels estudiants ([Mètodes Matemàtics Aplicats](#), [Fonaments de Mecànica Estadística](#) i [Estructura Electrònica](#)). En el segon semestre hi ha la presentació de diferents assignatures avançades de modelització ([Mètodes Avançats de Simulació Molecular](#) i [Mètodes Multiescala, Coarse-Grained i Mixtes](#)), d'informàtica i programació ([Eines Informàtiques Avançades](#)) i camps d'aplicació dels coneixements adquirits en les diferents assignatures optatives.

Per altra banda, l'optativitat del Màster permet a cada estudiant un **itinerari curricular** adaptat als seus interessos, ja que pot escollir entre l'oferta d'[assignatures optatives](#) del Màster, corresponents a diferents àmbits de la modelització computacional atomística i multiescala en àmbits molt generals de la física, la química i la bioquímica. i que li confereix un caràcter interdisciplinari.

Una altra característica a destacar, i que des de la coordinació del Màster es valora com un punt fort, és el fet que els estudiants poden escollir lliurement les seves assignatures optatives així com el grup de recerca on desenvolupen el seu TFM. Tot plegat porta a que els estudiants se senten més motivats i responsables del seu treball, i com a resultat obtenen una molt bona preparació general per a poder abordar tant un estudi específic en el camp de la recerca, en una posterior realització d'una Tesi Doctoral, com una preparació sòlida en coneixements

informàtics, de programació i d'eines de gestió i anàlisi de grans quantitats de dades que cada vegada es valoren més en el nostre entorn socioeconòmic.

Cal fer èmfasi en un altre punt fort del Màster: l'**adequació del professorat** implicat en la seva impartició i que garanteix el bon nivell que s'espera d'un ensenyament de Màster i permet el caràcter interdisciplinari característic d'aquest Màster. Tots els professors són doctors, membres de grups de recerca de reconegut prestigi en el camp de la modelització computacional, amb experiència tant docent com investigadora com es pot observar en la **Taula 4.1**

[Taula 4.1 \(E.4.1\). Dades Individuals del professorat del Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.](#)

Per últim, la interdisciplinarietat dels continguts del màster juntament amb la multidisciplinarietat dels estudiants que accedeixen al màster és genera una dinàmica de la docència impartida que ofereix moltes possibilitats de millora i innovació de la metodologia docent i, a través del contacte entre els estudiants, afavoreix un dels objectius del màster: una formació profundament interdisciplinària, tant en els aspectes més formals com en els objectius i aplicacions. En aquest sentit, valorem aquests dos aspectes dels grups-classe com a oportunitat i incentiu de millora i actualització constant del que considerem que és un màster molt actual i que ofereix una formació avançada a partir d'iniciar els estudiants en la recerca actual.

Un **punt feble** transversal a tots els Màsters de la Facultat de Química és no disposar de dades de satisfacció amb el Pla d'Acció Tutorial, el Treball final de Màster, així com de la inserció laboral dels nostres egressats. Els objectius a assolir i les accions de millora que impliquen estan descrits en la **Taula 4.2** (Pla de millores transversals per la Facultat de Química) i ja no es comenten en aquest punt.

Com a resultat de la detecció dels punts febles més específics del Màster en modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica, per part de la coordinació del Màster, han anat sorgint una sèrie de propostes de millora que van ser presentades en els corresponents informes de seguiment.

Algunes d'elles han suposat accions de caràcter puntual i es poden donar per assolides:

- S'ha modificat la memòria del títol per incloure les propostes de millora indicades en l'informe de verificació (actualització del conveni, justificar interès dels estudis com a sortides laborals i revisió del redactat de les competències del màster).
- El curs 2018-2019 s'ha creat una nova assignatura optativa: "[Modelització de Nanomaterials i Superfícies](#)" en substitució d'una optativa que no va tenir cap alumne matriculat durant els tres primers cursos d'impartició del màster.
- S'ha renovat la web del Màster amb tota la informació pertinent actualitzada regularment en català, castellà i anglès. També s'han publicat tots els plans docents en els tres idiomes.
- S'ha dut a terme la revisió dels [plans docents](#) de les assignatures per tal d'adequar els continguts a les competències pròpies de la matèria a la que estan vinculades, segons s'indica en la memòria de verificació, per minimitzar el solapament entre els continguts de diferents assignatures.
- Es va redactar, aprovar i implementar el [Pla d'Acció Tutorial](#), tal com s'ha indicat en l'estàndard 5.
- S'ha reduït el nombre de places ofertades a 25 alumnes per ajustar la oferta de places a la demanda real del màster.

- S'han posat en marxa diferents iniciatives per promocionar el màster en el nostre entorn universitari.

Així, a més a més de les millores discutides més amunt referents a les modificacions de la memòria, s'han destinat esforços importants a la **millora del web del Màster** que requereix una atenció continuada si es vol recollir de manera actualitzada tota la informació. Aquest és un aspecte complicat pel que fa a la seva gestió, donat que no sempre es disposa del suport necessari. Durant aquests cursos s'han traduït als tres idiomes, català, castellà i anglès, pràcticament totes les pàgines del web del Màster. Actualment s'està preparant un vídeo promocional per reforçar visualment el missatge del web i atreure l'interès de dels possibles estudiants amb les aplicacions i les eines que es fan servir en les diferents camps de la modelització computacional de sistemes físic-químics.

De la mateixa manera, la millora de la **difusió i promoció del Màster** és molt important per tal d'aconseguir arribar al màxim nombre de possibles estudiants, i que la informació sigui clarificadora sobre els objectius i capacitat formativa del Màster. Amb aquest objectiu la Comissió coordinadora fa l'avaluació de com s'ha dut a terme un curs i, com a resultat d'aquesta anàlisi, proposa com es pot fer el curs següent. El Màster es difon mitjançant les pantalles distribuïdes en diferents punts de la Facultat de Química, cartells i [fulls informatius](#), i de manera més presencial mitjançant la presentació del Màster als alumnes dels últims cursos dels Graus que s'imparteixen a les Facultats de Química i de Física de la UB, així com en el campus del Besòs de la UPC. No cal dir que en tot moment els estudiants que s'interessen de manera individual reben atenció personalitzada tant per mail com en persona.

Un dels aspectes que s'està treballant és en **fomentar la participació dels estudiants a les enquestes de satisfacció** amb les assignatures i el professorat. Com a conseqüència de les accions dutes a terme, al final de cada semestre, aquesta participació s'ha anat incrementant d'un curs a un altre tot i què encara cal millorar el nombre d'enquestes per assignatura per tenir una valoració més precisa, tant de l'assignatura com dels professors que la imparteixen.

Taula 4.1 (PM.1). Estat de les propostes de millora establertes en l'últim informe de seguiment

<i>Proposta de millora</i>	<i>Estat de la proposta de millora</i>	<i>Observacions</i>
Proposar una nova assignatura optativa i establir el pla docent	Implementada	- No s'ha pogut impartir l'assignatura optativa "Superfícies i Catàlisi" durant els tres primers cursos. -S'ha creat la nova assignatura de "Modelització de Nanomaterials i Superfícies" que s'ha pogut ofertar el curs 2018-19 amb 5 matriculats
Reduir les places ofertades pel curs 2018-19 per ajustar la oferta a la demanda	Implementada	S'han limitat a 25 el nombre de places ofertades pel curs 2018-19
Accions per donar resposta als requeriments de millora	Implementada	S'han introduït les modificacions suggerides a la memòria del títol

<i>Proposta de millora</i>	<i>Estat de la proposta de millora</i>	<i>Observacions</i>
provinents del procés de verificació		
Aprovació i publicació del PAT	Implementada	S'ha aprovat el PAT del màster i s'ha publicat a la web del màster
Incrementar la participació dels estudiants a les enquestes institucionals d'assignatura/professor	En procés d'implementació	S'ha observat un increment important en el percentatge de participació però cal millorar
Recollir dades d'inserció laboral i seguiment dels egressats de forma sistematitzada	En procés d'implementació	S'ha elaborat una enquesta que es farà a partir d'aquest curs.
Millorar la informació pública de l'oferta i criteris d'assignació dels TFM	En procés d'implementació	Al web del Màster s'ha incrementat la presència dels TFM realitzats pels estudiants i també ha augmentat el nombre de TFM disponibles en el Dipòsit digital de la UB
Establir enquesta tipus sobre procés de realització, formació i resultats del TFM	En procés d'implementació	S'ha elaborat una enquesta que es farà a partir d'aquest curs.
Augmentar la participació dels estudiants a les enquestes de satisfacció	En procés d'implementació	S'ha observat un increment important en el percentatge de participació

Vist aquest segon bloc de propostes que suposen seguir vetllant per a la millora d'aspectes ja proposats en els informes de seguiment dels cursos anteriors però, tot i que s'ha avançat, es pensa seguir-hi treballant ara, en el següent bloc, es presenten les **propostes noves** de cara als cursos 2019-2020 que es recullen en la **Taula 4.2**.

Taula 4.2 (PM.2). Pla de millores 2019-20

<i>Punt feble. Diagnòstic</i>	<i>Identificació de les causes que generen el punt feble diagnosticat</i>	<i>Objectius per assolir</i>	<i>Accions de millora proposades. Tasques.</i>	<i>Codi de l'acció de millora</i>	<i>Prioritat de l'acció</i>	<i>Responsable</i>	<i>Terminis. Calendari d'implantació</i>	<i>Implica modificació?*</i>	<i>Indicadors de seguiment de l'acció de millora</i>
Manquen dades d'inserció laboral i seguiment dels egressats de forma sistematitzada	No tenim enquesta	Creació i realització d'una enquesta que es passi una vegada a l'any	Creació d'una enquesta estàndard Passar-la als estudiants Analitzar les dades	AM01	alta	Comissió coordinadora del Màster	Curs 2019-2020	No	Nombre d'enquestes i respostes
Millorar la participació dels estudiants a les enquestes de satisfacció amb el PAT	No tenim enquesta	Creació i realització d'una enquesta que es passi una vegada a l'any	Creació d'una enquesta estàndard Passar-la als estudiants Analitzar les dades	AM02	alta	Comissió coordinadora del Màster	Curs 2019-2020	No	Nombre d'enquestes i respostes
Manca d'informació pública de l'oferta i dels criteris d'assignació de TFM	Actualment no es publica la informació de l'oferta i criteris d'assignació dels TFM. Actualitzar i publicar les línies de recerca dels grups on es	Millorar la informació pública de l'oferta, línies de recerca i criteris d'assignació dels TFM	Publicar a la web les fitxes dels projectes ofertats, les línies de recerca dels grups dels professors del màster, els criteris d'assignació i la llista d'assignació	AM03	mitja	Comissió coordinadora del Màster	Curs 2019-2020	No	Conèixer els projectes realitzats i les propostes noves. Publicar la llista de les línies de recerca que

<i>Punt feble. Diagnòstic</i>	<i>Identificació de les causes que generen el punt feble diagnosticat</i>	<i>Objectius per assolir</i>	<i>Accions de millora proposades. Tasques.</i>	<i>Codi de l'acció de millora</i>	<i>Prioritat de l'acció</i>	<i>Responsable</i>	<i>Terminis. Calendari d'implantació</i>	<i>Implica modificació?*</i>	<i>Indicadors de seguiment de l'acció de millora</i>
	poden fer els TFM.		de projectes de TFM						desenvolupen els professors del màster
Poc contacte amb empreses del sector que puguin incorporar egressats	Fins ara no tenim la possibilitat d'oferir projectes de TFM en empreses	Contactar amb empreses de l'entorn per poder desenvolupar de TFM en empreses	Contactar amb empreses del sector informàtic, consultoria i auditoria científica, big data, química, etc. de l'entorn	AM04	mitja	Comissió coordinadora del Màster	Curs 2020-2021	No	Poder oferir la possibilitat de realitzar projectes de TFM en empreses
Accés limitat a recursos de supercomputació per fer algunes pràctiques a l'aula	Actualment tenim accés limitat a BSC. Potència de càlcul limitada per algunes aplicacions en assignatures pràctiques que triguen massa temps en les màquines locals o CERQT2	Extendre l'accés al superordinador del BSC per a les assignatures pràctiques (actualment només a EIA com a pràctica de paral·lelització.	Extendre l'acord amb el BSC per poder accedir al superordinador en més assignatures i durant més hores	AM04	mitja	Comissió coordinadora del Màster	Curs 2020-2021	No	Satisfacció dels estudiants i dels professors amb els recursos computacionals disponibles

5. Evidències

Bona part de les evidències es troben publicades al Campus Virtual de la UB, on L'APQUB ha donat accés a un espai habilitat per a que cada centre pugui publicar tantes evidències com consideri necessàries. D'altra banda, hi ha evidències que per la seva naturalesa o disponibilitat només es troben en format paper i aquesta informació estarà a disposició del CAE durant la visita.

A la següent taula es relacionen totes les evidències que la Guia d'AQU Catalunya assenyalava que s'han de presentar vinculades a cada estàndard. S'especifica la localització concreta d'aquestes evidències que es disposen en format paper o en format electrònic,. En aquest darrer cas es troba l'enllaç web que redirecciona a la informació, si aquesta és pública, o a l'espai/carpeta concreta dintre del Campus Virtual on s'ha afegit aquesta evidència.

Núm.	Evidència	Localització
Elaboració de l'autoinforme		
	Acta d'aprovació de l'autoinforme	Campus Virtual
	Comentaris a l'autoinforme fruit de l'exposició pública	Campus Virtual
Estàndard 1. Qualitat del programa formatiu		
	Memòria actualitzada per a la verificació de la titulació	Al web d'APQUB
	Document d'aprovació del Consell d'Universitats	Al web d'APQUB
	Actes de les reunions de coordinació portades a terme	En format paper
Estàndard 2. Pertinència de la informació pública		
	Informació de la institució/titulació	Al web del centre
	Informes de seguiment de la titulació (IST)	Al web del centre
	Documentació lligada als processos del SAIQU sobre informació pública, recollida d'informació i retiment de comptes	Al web del centre
Estàndard 3. Eficàcia del sistema de garantia interna de la qualitat de la titulació		
	Documentació lligada als processos del SAIQU sobre el disseny, l'aprovació, el seguiment i l'acreditació de les titulacions	Al web del centre
	Procés del SAIQU sobre la revisió del mateix SAIQU	Al web del centre
	Taula d'evolució dels indicadors (descriptors globals de la titulació; resultats d'aprenentatge; satisfacció dels grups	Dades a l'espai VMSA, el web de de qualitat

Núm.	Evidència	Localització
	d'interès)	de la Facultat, els informes de seguiment i l'autoinforme
	Instruments de recollida de les dades sobre la satisfacció dels grups d'interès	A diferents webs de la universitat (veure autoinforme)
Estàndard 4. Adequació del professorat al programa formatiu		
	Perfil del professorat del centre (% doctor, % acreditat, permanent vs temporal)	Campus virtual
	Experiència docent (quinquennis obtinguts en el marc de DOCENTIA) i de recerca (sexennis)	Campus virtual
	Experiència professional (funcions, temps i àmbit) i de recerca (projectes de recerca del professorat implicat en el màster)	Campus virtual
	Indicadors de satisfacció dels estudiants sobre el professorat	Campus virtual
	Pla de formació del professorat o altres documents vinculats amb el suport que rep el professorat	ICE
	Concreció de la relació de les actuacions del Pla de formació del professorat de la UB en què ha participat el professorat del màster	Campus virtual
Estàndard 5. Eficàcia dels sistemes de suport a l'aprenentatge		
	Pla d'acció tutorial	Al web del Màster
	Satisfacció dels estudiants amb les accions d'orientació	No disponible
	Pla d'actuació institucional per facilitar la inserció laboral	Al web del centre
	Indicadors de satisfacció sobre les tutories acadèmiques i les accions d'orientació professional	No disponible
	Procés del SAIQU sobre el suport i l'orientació a l'estudiant (PEQ 050)	PEQ 050
	Processos del SAIQU sobre els recursos materials i els serveis (PEQ 110; PEQ 120)	PEQ 110 PEQ 120
	Indicadors d'ús i satisfacció sobre els serveis bibliotecaris	Espai VSMA

Núm.	Evidència	Localització
	i els centres de recursos per a l'aprenentatge	
	Indicadors de satisfacció sobre instal·lacions especialitzades (laboratoris, aules d'estudi, biblioteques...)	Espai VSMA
Estàndard 6. Qualitat dels resultats dels programes formatius		
	Processos del SAIQU vinculats al desenvolupament dels programes formatius per afavorir l'aprenentatge de l'estudiant i la recollida i anàlisi dels resultats per a la millora dels programes formatius (PEQ 060; PEQ 100, PEQ 130)	PEQ 060 PEQ 100 PEQ 130
	Taules E.6.1 Resultats d'aprenentatge rellevants de les assignatures seleccionades	Campus virtual
	Taules E.6.2 Activitats formatives en les assignatures seleccionades	Campus virtual
	Taules E.6.3 Sistemes d'avaluació en les assignatures seleccionades	Campus virtual
	Taules E.6.4 Qualificacions de totes les assignatures de l'estudi	Campus virtual
	Taules E.6.5 Llista dels TFM del curs acadèmic en curs	Campus virtual
	Mostra de les execucions dels estudiants. Exemples de proves avaluadores dels estudiants que cobreixin l'espectre de qualificacions. Una evidència per qualificació per a cada una de les assignatures	Campus virtual En format paper
	Indicadors de resultats. Taules E.6.7	Espai VSMA
	Indicadors d'inserció laboral. Taules E.6.8	No disponible