

**Programa Cursos de Formación Avanzada 2022-2023**  
Doctorado en Química Orgánica

**01. Química computacional (5h)**

**Profesor(es) que imparten el curso:**

Israel Fernández López (Profesor Titular de Universidad Universidad; Investigador Principal del grupo de Química Computacional del Departamento de Química Orgánica, <https://www.ucm.es/computchem/>)

**Programa del curso:**

1. Introducción.
2. Métodos Computacionales: ab initio, semiempíricos, DFT, mecánica molecular. Funciones de base.
3. Métodos de solvatación.
4. Reactividad química. Superficies de energía potencial.
5. Casos prácticos. Aplicaciones en química orgánica.

**02. Técnicas especiales y síntesis orgánica sostenible (5h)**

**Profesor(es) que imparten el curso:**

Paloma Martínez Ruiz (Catedrática de Universidad; Grupo NANOSMAQ: Nanosensores y Nanomáquinas, <https://produccioncientifica.ucm.es/grupos/5434/detalle>)

Beatriz Lora Maroto (Profesora Titular de Universidad; Grupo COLORGANIC: Colorantes Orgánicos para Materiales Fotónicos, <https://www.ucm.es/colorganic/>).

**Programa del curso:**

1. Técnicas especiales en síntesis orgánica en el marco de la Química Sostenible y los ODS de la Agenda 2030.
2. Síntesis orgánica en medios no convencionales: ausencia de disolvente, agua, fluidos supercríticos, líquidos iónicos, disolventes eutécticos, fase heterogénea, medios multifásicos.
3. Síntesis orgánica bajo condiciones no convencionales: alta presión, alto vacío, ultrasonidos, microondas, electroquímica.
4. Uso combinado de técnicas especiales: Síntesis orgánica en paralelo y en flujo continuo.

**03. Transferencia de los resultados de investigación e investigación colaborativa con la empresa (10h)**

**Profesor(es) que imparten el curso:**

Guillermo Orellana Moraleda (Catedrático de Universidad; Director del Grupo de Investigación UCM en Sensores químicos ópticos y Fotoquímica aplicada – GSOLFA, <https://www.gsolfa.info/>)

**Programa del curso:**

1. ¿Para qué, qué resultados, cuándo y cómo transferir a la empresa?

2. ¿Es necesario patentar? ¿Es importante hacerlo? ¿Cómo se hace?
3. Estructura y contenido de un convenio de investigación colaborativa.
4. Desarrollo de las actividades de investigación en el marco de un convenio de investigación colaborativa con la empresa.
5. Emprendimiento y empresas “*spin-off*”.

#### 04. Nuevas tecnologías en el descubrimiento de fármacos (5h)

##### Profesor(es) que imparten el curso:

Henar Vázquez Villa (Profesora Contratada Doctora; Grupo de Investigación UCM en Química Médica y Biológica, <https://webs.ucm.es/info/quimicamedica/>)

Santiago Cañellas Román (Senior Scientist, Janssen R&D)

##### Programa del curso:

1. Métodos de funcionalización en etapa tardía (*late-stage functionalization*, LSF): Aplicación en el desarrollo de fármacos.  
Funcionalización basada en reacciones de fotocatalisis, electroquímica, procesos radicalarios y biocatalisis.  
Transformación de grupos funcionales e introducción de bioisómeros.
2. Experimentación de alto rendimiento (*high-throughput experimentation*, HTE): Optimización y desarrollo de reacciones.  
Descubrimiento de nuevos modos de reactividad.
3. Síntesis automatizada en la industria farmacéutica: Plataformas de síntesis en paralelo y de flujo continuo. Optimización en *closed-loop*.

#### 05. El químico en la industria (5h)

##### Profesor(es) que imparten el curso:

María Angeles Martínez Grau (Directora de I+D, Justesa Imagen, <https://www.grupojuste.com>)

##### Programa del curso:

1. El químico en la industria químico-farmacéutica.
2. Principios activos y productos terminados.
3. Fabricación de principios activos por síntesis orgánica.
4. Síntesis orgánica a gran escala: De gramos a toneladas.
5. Evolución de las tecnologías sintéticas en las últimas décadas y nuevas aproximaciones moleculares.