

Curriculum Vitae

Dra. Patricia Guadarrama Acosta

Teléfono: 56224594; fax 56161201.

E-mail: patriciagua@correo.unam.mx.

Institución de Adscripción: Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM. Circuito Exterior s/n, Ciudad Universitaria, apartado postal 70-360. Coyoacán, 04510 México, D.F.

Nombramiento: Investigadora Titular B de Tiempo Completo.

Estímulos Académicos

PRIDE Nivel C

SNI Nivel 1

Última promoción: 25/10/2007.

Formación Académica

Profesional.

Licenciatura en Química (Facultad de Química, UNAM). C.U. (1989-1993). Tesis: Estudio teórico sobre la reactividad de eninos (Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM). Fecha de titulación: 14 de junio de 1994. Cédula profesional: 2016716.

Posgrado.

Maestría en Ciencias Químicas (Química Orgánica), Facultad de Química (1995-1997) Tesis: Síntesis, caracterización y estudio teórico de compuestos hiper-ramificados poli-insaturados (Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM). Fecha de titulación: 25 de noviembre de 1997. Cédula profesional: 2749738.

Doctorado en Ciencias Químicas (Química Orgánica) de la Facultad de Química. Tesis: Síntesis de oligómeros dendriméricos conjugados bien definidos y polímeros hiper-ramificados con propiedades electroluminiscentes y de óptica no lineal mediante el uso de soportes poliméricos (Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM). Fecha de titulación: 27 de junio de 2000. Cédula profesional: 3291004.

Estancia posdoctoral: Center of Molecular Design and Recognition (Universidad del Sur de Florida, E.U.). Tema: Síntesis y simulación molecular de dendrímeros. Supervision: Dr. George Newkome (2000-2001).

Distinciones

-Primer lugar en el *VII Premio Anual de Servicio Social Universitario “Gustavo Baz Prada”* en el área tecnológica de polímeros funcionales en 1993. (trabajo realizado en el Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM).

-Premio *Alfonso Caso* al graduado más distinguido del Doctorado en Ciencias en **2000**.

Publicaciones

- 1) R. Salcedo; T. Ogawa; A. Pineda; M. Rubio; M. García; P. Guadarrama, *Polymer* **1992**, 33, 5300-5302. Chemical Pathways for the polymerization of enines.
- 2) L. E. Sansores; R. Salcedo; L. Fomina; P. Guadarrama, *J. Mol. Structure* **1997**, 389, 217-226. Electronic Structure study of planar conjugated eight-membered ring compounds.
- 3) L. Fomina; P. Guadarrama; S. Fomine; R. Salcedo; T. Ogawa, *Polymer* **1998**, 39, 2629-2635. Synthesis and characterization of well defined fully conjugated hyperbranched oligomers of β,β -dibromo-4-ethynylstyrene.
- 4) R. Salcedo; L. E. Sansores; P. Guadarrama, *J. Mol. Structure* **1998**, 430, 23-27. Stability of centrohexaindane.
- 5) S. Fomine; L. Fomina; P. Guadarrama, *Macromol. Theory Simul.* **1999**, 8, 54-60. Molecular modelling of hyperbranched polyacetylene.
- 6) P. Guadarrama; L. Fomina; V. Pankov; W. Matus; S. Fomine, *Polymer J.* **1999**, 31, 423-428. Solid-supported synthesis of hyperbranched polymer with discrete conjugated units.
- 7) S. Fomine; L. Fomina; P. Guadarrama, *J. Mol. Structure* **1999**, 488, 207-216. Electronic structure of fully conjugated dendritic oligomers of β,β -dibromo-4-ethynyl styrene.
- 8) L. Fomina; P. Ponce; P. Guadarrama; S. Fomine, *Macromol. Theory Simul.* **1999**, 8, 403-408. Effect of terminal groups on the electronic structure of hyperbranched polyacetylene.
- 9) P. Guadarrama; L. Fomina; S. Fomine, *Macromol. Theory Simul.* **2000**, 9, 263-269. Molecular modelling of solid-supported polymerisation of 4-(5-hexynyloxy)- β,β -dibromo styrene.
- 10) P. Guadarrama; L. Fomina; S. Fomine, *Polymer* **2001**, 50, 76-83. Solid-supported synthesis of hyperbranched polymer with β,β -diethynylstyryl units.
- 11) I García-Cruz; J.M. Martínez-Magadán; P. Guadarrama; R. Salcedo, F. Illas; *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107, 1597-1603. Electronic Structure Properties of Carbazole-like Compounds: Implications for Asphaltene Formation.
- 12) S. Fomine*, L. Fomina, P. Guadarrama, *Macromol. Symp.^a*, **2003**, 192, 43-61. Synthesis, properties and molecular modeling of functional hyperbranched polymers and dendrimers. **a: Factor de Impacto: 0.758**
- 13) P. Guadarrama*; S. Fomine; R. Salcedo, *J. Mol. Mod.*, **2003**, 9, 273-282. Cyclen substitution with urea-containing dendrimeric branches. Theoretical study considering the concept of collectivity.
- 14) A. Reyes; M. Tlenkopatchev; L. Fomina, P. Guadarrama, S. Fomine*, *J. Phys. Chem. A* **2003**, 107, 7027-7031. Local MP2 based method for estimation of intermolecular interactions in aromatic molecules. Benzene, Naphthalene and Pyrimidine dimers. A comparison with canonical MP2 method.
- 15) L. Fomina, A. Reyes, P. Guadarrama, and S. Fomine ONIOM (MP2:PM3) Study of C₆₀-water Complex. *International Journal of Quantum Chemistry*, **2004**, 97, 679-687.
- 16) Gabriela Osorio; Carlos Frontana; Patricia Guadarrama*; Bernardo A. Frontana-Uribe*, *J. Phys. Org. Chem.* **2004**, 17, 439-447. Electrochemical and Theoretical Study of a Family of Fully Conjugated Dendritic Oligomers.
- 17) Delia Soto-Castro; Patricia Guadarrama*, *J. Comput. Chem.* **2004**, 25, 1215-1226. Macrocyclic versus Dendrimeric effect. A DFT study.
- 18) Aurelio Evangelista-Lara, Patricia Guadarrama*, *Int. J. Quantum Chem.* **2005**, 103, 460-470. Theoretical Evaluation of the Nano-carrier Properties of Two Families of Functionalized-Dendrimers.

- 19) Carlos Romero, Patricia Guadarrama, Serguei Fomine*, *J. Mol. Mod.*, **2005**, 12, 85-92. Interactions in Molecular Switches based on Crown Ethers-secondary Ammonium Motifs. A Theoretical Study.
- 20) Jorge A. Cruz-Morales; Patricia Guadarrama*, *J. Mol. Structure*, **2005**, 779, 1-10. Synthesis, Characterization and Computational Modeling of Cyclen Substituted with Dendrimeric Branches. Dendrimeric and Macrocyclic Moieties Working Together in a Collective Fashion.
- 21) Roberto Salcedo, Ana Martínez, Patricia Guadarrama Carlos Olvera, L. Enrique Sansores, *J. Mol. Struc. THEOCHEM* **2006**, 758, 49-52. A theoretical study of aromaticity in 1,2-diaza and 1,2-diphospha-cyclooctatetraenes and their role as ligands in organometallic compounds.
- 22) Carlos E. Lobato-García, Patricia Guadarrama, Concepción Lozada, Raúl G. Enríquez, Dino Gnecco, Wiliam F. Reynolds, *Journal of Molecular Structure*, **2006**, 786, 53-64. Study of Minimum Energy Conformers of N-substituted Derivatives of Piperidine and Pyrrolidine. Evidence of Weak H-bonding by Theoretical Correlation with Experimental NMR Data.
- 23) Carolina Tabares-Mendoza, Patricia Guadarrama*, *J. Organomet. Chem.* **2006**, 691, 2978-2986. Predicting the catalytic efficiency by quantum-chemical descriptors. Theoretical study of pincer metallic complexes involved in the catalytic Heck reaction.
- 24) Serguei Fomine and Patricia Guadarrama, *J. Phys. Chem. A*, **2006**, 110, 10098-10105. Oligothiophene Catenanes and Knots: A Theoretical Study.
- 25) Delia Soto-Castro, Aurelio Evangelista-Lara, Patricia Guadarrama*, *TETRAHEDRON*, **2006**, 62, 12116-12125. Theoretical Design of Dendrimeric Fractal Patterns for the Encapsulation of a Family of Drugs: Salicylanilides.
- 26) Serguei Fomine, Patricia Guadarrama, Mikhail Zolotukhin, *Int. J. Quantum Chem.*, **2007**, 107, 685-693. DFT and local MP2 study of switching process in a pH controllable molecular "shuttle".
- 27) Juan Olguín, Hugo Vázquez Lima, Alonso Rubio, Simón Hernández-Ortega, Patricia Guadarrama*, and Ivan Castillo*, *Supramolecular Chemistry*, **2007**, 19, 587-597. Conformational preferences of bispicolyl-p-tert-butylcalix[4]arene anions: synthesis of cone and partial-cone conformers of bispicolyl-bis-(tert-butoxycarbonyl)methoxy-p-tert-butylcalix[4]arene.
- 28) Serguei Fomine, Patricia Guadarrama, Paola Flores, *J. Phys. Chem. A*, **2007**, 111, 3124-3131. Oligothiophene Catenanes and Knots. Part II. Mono and Dications. A theoretical Study.
- 29) Patricia Guadarrama*, Delia Soto-Castro, Jesús Rodríguez Otero, *Int. J. Quantum Chem.*, **2008**, 108, 229-237. Performance of DFT hybrid functionals in the theoretical treatment of H-bonds. Analysis term by term.
- 30) Flores, Paola; Guadarrama, Patricia; Ramos, Estrella; Fomine, Serguei, *Journal of Physical Chemistry A*, **2008**, 112, 3996-4003. Tubular aggregates of cyclic oligothiophens. A theoretical study.
- 31) Patricia Guadarrama, Serguei Fomine, Roberto Salcedo, Ana Martínez, *Biophysical Chemistry*, **2008**, 137, 1-6. Construction of simplified models to simulate estrogenic disruptions by esters of 4-hydroxy benzoic acid (parabens).
- 32) Estrella Ramos, Patricia Guadarrama, Gerardo Terán and Serguei Fomine, *Journal of Physical Organic Chemistry*, **2008**, **En prensa**. Push-pull hyperbranched molecules. A theoretical study.

Publicaciones Nacionales

- 1) P. Guadarrama*; S. Fomine; L. Fomina, *Boletín de la SPM*, **2003**, 2, 3-14. Síntesis, propiedades y modelado molecular de dendrímeros y polímeros hiper-ramificados conjugados.
- 2) Jorge Armando Cruz Morales; Patricia Guadarrama*, *Materiales Avanzados*, **2004**, 3, 19-28. Dendrímeros: Imitando a la Naturaleza.
- 3) Patricia Guadarrama, Serguei Fomine, Roberto Salcedo Pintos, Ana Martínez, *Materiales Avanzados*, **2007**, 8, 9-14. Cosméticos en la mira: Los parabenos y el cáncer.

Artículos in Extenso

- 1) R. Salcedo; P. Guadarrama; L. E. Sansores; S. Fomine; L. Fomina, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **1999**, 560, 359-364. Theoretical description of luminescent effects in β,β -Di (4'-formylphenylethynyl)-4-ethynylstyrene.

Capítulos en libros:

- 1) S. Fomine; L. Fomina; P. Guadarrama, *Recent Advances in Macromolecules*. Global Research Network, Ed. R. Mohan Killioalam, Thiruvanthapuram 36, p.57-71, **2000** ISBN 81-87736-04-06. Synthesis, properties and molecular modeling of conjugated hyperbranched polymers and dendrimers.

Congresos

- 1) *XXX Congreso Mexicano de Química* (**1993**; Cancún, Q. Roo). Trabajo: Síntesis y caracterización de compuestos de Ru(III) con bases de Schiff (N₂O₂)-5,5'-sustituídas. P. Guadarrama, R. Moreno, L. Ruíz.
- 2) *International Materials Research Congress Cancun 97* (**1997**). Trabajo: Synthesis and characterization of well-defined fully conjugated hyperbranched oligomers. P. Guadarrama, S. Fomine, R. Salcedo.
- 3) *XXXIII Congreso Mexicano de Química* (**1998**; Oaxaca). Trabajo: Síntesis de oligómeros dendriméricos bien definidos empleando soportes sólidos. P. Guadarrama, S. Fomine.
- 4) *XII Congreso Nacional de Polímeros* (**1999**; Mérida). Trabajo: Síntesis de oligómeros hiper-ramificados con unidades insaturadas discretas mediante el uso de soportes sólidos. P. Guadarrama, S. Fomine.
- 5) *7th Pacific Polymer Conference* (**2001**; Oaxaca). Trabajo Solid-Supported Synthesis of Hyperbranched Polymer with Discrete Conjugated Units. P. Guadarrama, S. Fomine.
- 6) *6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists* (**2002**; Lugano, Suiza). Trabajo: Molecular modeling of solid-supported polymerization of 4-(5-hexynyloxy)- β,β -dibromostyrene. P. Guadarrama, S. Fomine.
- 7) *8th Pacific Polymer Conference* (**2003**; Bangkok, Tailandia). Trabajo: Cyclen substitution with urea-containing dendrimeric branches. Theoretical study considering the concept of collectivity. P. Guadarrama, S. Fomine, R. Salcedo.
- 8) International Conference of Supramolecular Science & Technology (**2004**; Praga, República Checa). Presentación oral: Macrocyclic vs Dendrimeric effect. A DFT Study. Delia Soto-Castro; Patricia Guadarrama.

9) ESF Research Conference on Supramolecular Chemistry (2005, Estrasburgo, Francia). Trabajo: Theoretical Design of Dendrimeric Nanocarriers. Evaluation of Two Families of Functionalized Dendrimers. Aurelio Evangelista-Lara, Patricia Guadarrama.

10) International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2006 (ICCMSE 2006) (Chania-Creta, Grecia). Presentación oral: Predicting the catalytic efficiency by quantum-chemical descriptors. Theoretical study of pincer metallic complexes involved in the catalytic Heck reaction. Carolina Tabares-Mendoza, Patricia Guadarrama.

11) 43rd Symposium on Theoretical Chemistry (STC2007) (Saarbruecken, Alemania, 16-20 septiembre). Póster: Theoretical analysis of simple models of nitrogenases based on molybdenum (III). Modification of the electronic environment to modulate the catalytic activity. P. Guadarrama, H. Vázquez-Lima.

Formación de Recursos Humanos

Tesis dirigidas

Terminadas:

1) Tesis de licenciatura: Simulación molecular de macrociclos sustituidos con ramificaciones dendriméricas. Estudio de sus propiedades catalíticas y de reconocimiento molecular. **Alumna:** Delia Soto Castro. *Facultad de Química*. **Grado:** Ingeniera Química/Mención honorífica (4 de febrero 2004).

2) Tesis de licenciatura: Simulación Molecular de Dendrímeros funcionalizados para acarrear fármacos. **Alumno:** Aurelio Evangelista Lara. *Facultad de Química*. **Grado:** Ingeniero Químico/Mención honorífica (14 de Octubre de 2004).

3) Tesis de licenciatura: Síntesis de macrociclos sustituidos con ramificaciones dendriméricas. Estudio de sus propiedades catalíticas y de reconocimiento molecular. **Alumno:** Jorge Armando Cruz Morales. *Facultad de Química*. **Grado:** Ingeniero Químico (30 de Noviembre de 2005).

4) Tesis de Licenciatura: Diseño, mediante simulación molecular, de nanocatalizadores dendriméricos funcionalizados con ligantes organometálicos tipo “pinza”, para reacciones de acoplamiento C-C.

Alumno: Carolina Tabares Mendoza. *Facultad de Química*. **Grado:** Química/Mención honorífica (7 de septiembre de 2006).

5) Tesis de Maestría: Estudio de la arquitectura dendrimérica en procesos de encapsulamiento molecular. Evaluación geométrica y electrónica de nuevos patrones fractales en dendrímeros para el diseño de sistemas huésped-anfitrión eficientes.

Alumno: Delia Soto Castro. IIM-UNAM. **Grado:** Maestra en Ciencias/Mención honorífica (17 de agosto de 2006).

6) Tesis de Maestría: Análisis teórico de modelos de catalizadores tipo triamidoamina de Mo(III). Ponderación de efectos y diseño de nuevos modelos.

Alumno: Hugo Vázquez Lima. Facultad de Química. Grado: Maestro en Ciencias (9 de agosto de 2007).

En proceso:

7) Tesis de Maestría: Síntesis y caracterización de materiales dendriméricos fotovoltaicos (**Avance: 90%**).

Alumno: José Gerardo Terán Escobar. IIM-UNAM

8) Tesis de Maestría: Síntesis y caracterización de dendrímeros flexibles con grupos de reconocimiento molecular en la periferia. (**Avance: 70%**).

Alumno: Jorge Armando Cruz Morales. IIM-UNAM.

9) Tesis de Maestría: Diseño, mediante simulación molecular, de catalizadores con aplicación en polimerización radicalica viviente (**Avance: 70%**)

Alumno: Abel García Lorenzo. IIM-UNAM.

10) Tesis de Doctorado: Síntesis de compuestos dendriméricos y su estudio como agentes encapsulantes de fármacos (**Avance: 40%**).

Alumno: M. en C. Delia Soto Castro. IIM-UNAM

11) Tesis de Doctorado: Diseño de mimicos dendriméricos de peroxidasas para degradación de colorantes altamente contaminantes. (**Avance: 30%**)

Alumno: Hugo Vázquez Lima.

12) Tesis de Doctorado: Síntesis de nuevos materiales dendríticos y su potencial aplicación en terapia macromolecular contra cáncer. (avance:inicio).

Alumno: José Martín Landeros Gálvez.

Cursos impartidos

1998. Asignatura: Química Orgánica. ITESM, campus Ciudad de México. División Preparatoria.

2002. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2003-1).

2003. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2003-2).

2003. Profesor de la materia optativa “Materiales Funcionales Orgánicos “ (clave: 61420). Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales (IIM) (Período 2003-2).

2003. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2004-1).

2004. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2004-2).

2004. Profesor de la materia optativa “Materiales Funcionales Orgánicos “ (clave: 61420). Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales (IIM) (Período 2004-2).

2004. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2005-1).

2005. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2005-2).

2005. Profesor de la materia optativa “Materiales Funcionales Orgánicos “ (clave: 61420). Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales (IIM) (Período 2005-2).

2005. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2006-1).

2006. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2006-2).

2006. Profesor de la materia optativa “Materiales Funcionales Orgánicos “ (clave: 61420). Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales (IIM) (Período 2006-2).

2006. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2007-1).

2007. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2007-2).

2007. Profesor de la materia optativa “Materiales Funcionales Orgánicos “ (clave: 61420). Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales (IIM) (Período 2007-2).

2007. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2008-1).

2008. Profesor de Asignatura “A”. Química Orgánica I (clave 1345). Facultad de Química, UNAM (Periodo 2008-2).

2008. Profesor de la materia optativa “Materiales Funcionales Orgánicos “ (clave: 61420). Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales (IIM) (Período 2008-2).

Colaboradores: Dr. Serguei Fomine (IIM), Dr. Roberto Salcedo (IIM), Dra. Ana Martínez (IIM), Dra. Estrella Ramos Peña (IIM)m Dr. Bernardo Frontana (I.Q), Dr. Iván Castillo (I.Q.), Dr. Jorge Luis Folch Mallol (Centro de Investigación en Biotecnología, Morelos), Dr. Jesús Rodríguez Otero (Universidad de Santiago de Compostela, España).

Proyectos financiados

- 1) “Síntesis de macrociclos sustituidos con ramificaciones dendriméricas. Estudio teórico y experimental del efecto cooperativo de diferentes funcionalidades y su aplicación en reconocimiento molecular y catálisis” (Proyecto de Instalación, CONACYT-139584, 2001-2002)
- 2) “Estudio sistemático de reactividad en procesos de polimerización radicalica viviente catalizada por metales, empleando herramientas de Química Computacional” (PAPIIT-IN100906). vigente.
- 3) “Síntesis y caracterización de nuevos materiales dendríticos para su evaluación comparativa en procesos de acarreamiento/encapsulamiento de fármacos anticancerígenos” (CONACYT). Vigente.

Eventos internos IIM

- 1) Organización de seminarios del IIM (2002).
- 2) Organización del evento “Puertas Abiertas” del IIM (2002, 2003, 2004, 2005).
- 3) Organización de la Escuela en Ciencia e Ingeniería de Materiales 2004, 2008.
- 4) Organización de Coloquios 2004, 2008.

Difusión

- Impartición del curso “Química Supramolecular” para profesores del CCH-Sur. (Septiembre-2006).

- Plática invitada en el Centro de Investigación en Biotecnología (Universidad Autónoma del Estado de Morelos): “Diseño y síntesis de dendrímeros para aplicaciones específicas” (Junio, **2007**).
- Plática invitada en la Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima: “Diseño y síntesis de dendrímeros para aplicaciones específicas” (Noviembre 27, **2007**).
- Entrevista en el periódico “El Universal”, sección: Proyecto UNAM: Macromoléculas para encapsular fármacos. 8 de mayo de 2008.

Líneas de Investigación:

1) Síntesis y caracterización de sistemas dendriméricos y supramoleculares con propiedades de catálisis y reconocimiento molecular. **2)** Simulación molecular de sistemas supramoleculares. **3)** Síntesis y caracterización de dendrímeros con propiedades ópticas.

Última actualización: octubre 2008.