

Premio Nacional de Química «Andrés Manuel del Río» 2023 en Área Académica, categoría Investigación Científica: Dr. Jorge Peón Peralta



Dr. Jorge Peón Peralta, Instituto de Química,
Universidad Nacional Autónoma de México

El Dr. Jorge Peón Peralta se graduó de Químico en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México en 1995. A continuación, cursó el doctorado en *The Ohio State University* (OSU) bajo la dirección del profesor Bern Kohler (actualmente profesor eminente del estado). A lo largo sus estudios de posgrado, contó con becas de la OSU a través de proyectos financiados. Como estudiante de posgrado el Dr. Peón participó en el desarrollo de uno de los primeros sistemas de pulsos láser capaces de observar fenómenos moleculares con resolución de femtosegundos. En esta etapa realizó estudios pioneros sobre la separación y recombinación de carga, contribuyendo a la comprensión de la competencia entre la recombinación de carga y la dinámica de solvatación. Estos trabajos permitieron comprender cómo esta competencia dicta la eficiencia de muchas reacciones de transferencia de electrones y de la ionización de baja energía.

Posteriormente, el Dr. Peón realizó estudios posdoctorales en el *California Institute of Technology* (Caltech) en el grupo de investigación del Prof. Ahmed H. Zewail (Premio Nobel de Química, 1999) mediante el financiamiento de la *National Science Foundation* de los E.U. Durante esta etapa, demostró por primera vez la viabilidad de resolver en el tiempo la fotodinámica del ADN mediante la detección de fotones emitidos desde estados superiores. Lo anterior fue logrado al hacer interactuar los fotones emitidos con pulsos láser ultracortos en cristales de óptica no-lineal. Estos resultados corresponden a una extensión de algunas de las líneas del Dr. Peón durante su doctorado, y despertaron un gran interés a nivel mundial, ya que revelaron el mecanismo por el cual las bases del ADN pueden eliminar varios electrones-volt de energía electrónica.

Los estudios sobre la evolución de los estados superiores del ADN en los que participó el Dr. Peón revelaron que la mencionada relajación se presenta gracias a la existencia de intersecciones

cónicas (regiones en las superficies de energía potencial donde el primer singulete excitado “cruza” el estado fundamental electrónico). Este mecanismo de relajación proporciona a las bases purínicas y pirimidínicas del ADN de una importante fotoestabilidad. Hoy en día, se considera que este mecanismo formó parte de los procesos de selección fotoquímica que ocurrieron durante las primeras etapas de la evolución molecular en la Tierra (etapas donde la superficie del planeta estaba sujeta a una intensa irradiación de luz UV, previa a la formación de la capa de ozono). Como se mencionará más abajo, años más tarde ya en la UNAM, el grupo del Dr. Peón realizó otra serie de contribuciones adicionales en esta línea demostrando que dichos canales de relajación son intrínsecos de ciertos anillos heterocíclicos y que no está asociado a los patrones de sustitución de los anillos como se sospechaba anteriormente.

Durante sus estudios postdoctorales en Caltech, el Dr. Peón también formó parte del primer equipo que estudió la dinámica de intercambio de moléculas de agua en la superficie de las proteínas. La interacción de moléculas de agua con regiones específicas en la superficie de todas las proteínas juega un papel central en las fluctuaciones estructurales de estas macromoléculas.

El Dr. Peón ingresó al Instituto de Química de la UNAM directamente como Investigador Titular en 2003 donde desarrolló el primer laboratorio de espectroscopía láser en Latinoamérica. Cabe mencionar que el diseño óptico de la fuente de luz pulsada de este laboratorio y la instrumentación de los experimentos fueron desarrollados dentro del grupo de investigación, incluyendo los códigos de control y de análisis de datos. Esta infraestructura ha estado funcionando ininterrumpidamente desde entonces, manteniendo los mayores estándares del área a nivel mundial.

Los primeros estudios en el área de la femtoquímica por parte del Dr. Peón, ya en México, se enfocaron en la fotoquímica de compuestos poliaromáticos nitrados. Estas moléculas son contaminantes atmosféricos altamente tóxicos, presentes en diversas formas, incluyendo como adsorbatos en partículas coloidales. La principal ruta de degradación de estas moléculas ocurre a través de reacciones fotoquímicas (principalmente la disociación de óxido nítrico), lo que implica que la comprensión de la dinámica de sus estados excitados es crucial para comprender su abundancia relativa y encontrar formas de eliminarlas del medio ambiente. Las investigaciones del grupo del Dr. Peón en la UNAM revelaron por primera vez la compleja foto-dinámica de este tipo de moléculas. Específicamente, se determinó que estos sistemas experimentan un paso de cambio de multiplicidad electrónica sorprendentemente rápido (cruce entre sistemas) que da origen a estados excitados de multiplicidad triplete a través de estados intermediarios (tripletes "receptores"). Estos estudios también

permitieron determinar los mecanismos de disociación de óxido nítrico de estas moléculas. El mecanismo de disociación ocurre con rendimientos variables justamente debido a que ocurre en paralelo con el mencionado canal de cruce singulete-triplete. Gracias a los trabajos del Dr. Peón, la fotoquímica de estas moléculas puede resumirse hoy en día como una competencia cinética entre un cambio de estado de espín ultrarrápido, y el canal de reordenamiento y disociación del óxido nítrico.

La dinámica del cambio de multiplicidad en moléculas nitroaromáticas es sin duda una de las contribuciones de mayor relevancia científica en la carrera del Dr. Peón. Estos resultados se resumieron recientemente en un artículo destacado (Feature) en la revista *Chemical Communications* (2021). Respecto a esta línea de trabajo, es importante enfatizar que las observaciones sobre los cambios de multiplicidad observados en el laboratorio del Dr. Peón en la UNAM corresponden a un descubrimiento fundamental en fotoquímica ya que revelaron la existencia de un nuevo tipo de acoplamiento molecular: La interacción espín-vibronica. La teoría de este tipo de interacciones se desarrolló por diversos grupos de química teórica basándose en los resultados experimentales del Dr. Peón, y encuentra descrita por ejemplo en el artículo: *Chemical Reviews: Spin-Vibronic Mechanism for Intersystem Crossing 2018*, 118, 15, 6975–702 (Penfold et al.), donde se citan los trabajos del Dr. Peón.

Otro proceso fotoquímico fundamental estudiado por el laboratorio del Dr. Peón en México es la transferencia intramolecular de protones en estados excitados, donde la dinámica de esta reacción se determinó por primera vez utilizando técnicas de fluorescencia ultrarrápida. Los resultados indicaron que este proceso se da sin involucrar barreras energéticas, ocurriendo en la escala de una única vibración molecular. Los resultados experimentales en estos sistemas han resultado de gran importancia, ya que han servido para identificar tanto la naturaleza del proceso, como para establecer cuáles son los métodos de química computacional (incluyendo funcionales de la densidad) que son capaces de predecir la forma real de la superficie de energía potencial en un estado electrónico superior. Como una extensión del estudio de la fotofísica de las bases de Schiff, el grupo del Dr. Peón diseñó nuevos sistemas cromóforos en los que se utiliza el esqueleto molecular de una base de Schiff, pero ahora, como ligandos en una serie de compuestos organometálicos de estaño IV. Se demostró que estos complejos pueden diseñarse para tener absorbancia y emisiones en diferentes regiones del espectro.

El grupo del Dr. Peón también ha realizado diversas contribuciones en el tema de la transferencia intramolecular de energía. Se han estudiado los procesos de migración excitónica en diversos sistemas, incluyendo las ftalocianinas. Estos sistemas se emplearon para demostrar que es posible realizar una excitación óptica indirecta en macrociclos a través de un proceso de transferencia de energía en el que el evento de absorción de luz inicial realmente ocurre en sus ligandos axiales. Se demostró que el proceso ocurre en una escala de tiempo ultrarrápida, con un rendimiento del 100%, e involucrando estados "oscuros" (con fuerza de oscilador nula) a través de un mecanismo de intercambio electrónico.

Abundando sobre una de las líneas de trabajo del Dr. Peón mencionada anteriormente, desde los primeros estudios en los grupos de Zewail y Kohler, había persistido una importante pregunta con respecto a la fotoquímica de las bases nitrogenadas:

¿Cuál es la arquitectura heterocíclica más básica en la que las intersecciones cónicas están presentes y dominan la dinámica del estado excitado? Al abordar este problema, el grupo de investigación del Dr. Peón en la UNAM estudió variantes simplificadas del cromóforo de guanina. A través de estudios de estos compuestos y de modificaciones en su estado de protonación, fue posible distinguir muchos de los detalles de la estructura electrónica que determinan si uno de estos heterociclos puede acceder de manera eficiente a las geometrías de la intersección cónica. Estas investigaciones resolvieron conclusivamente que el fenómeno de relajación electrónica es intrínseco de ciertos anillos heterocíclicos y que no está directamente relacionado con el patrón de sustitución de estos sistemas.

Entre los intereses más recientes del grupo del Dr. Peón se destaca el desarrollo de cromóforos funcionales para el control de actuadores moleculares por absorción bifotónica. En esta línea de trabajo se demostró que, con la absorción simultánea de dos fotones por parte de cromóforos auxiliares (antenas moleculares), es posible inducir reacciones químicas a una profundidad variable con una resolución espacial menor a una micra cúbica.

Las contribuciones del Dr. Peón han sido citadas en más de 4500 ocasiones (Google Scholar). Entre sus presentaciones internacionales invitadas más relevantes se encuentran: *Ultrafast and Ultrasmall: New Frontiers in AMO Physics*, la *Photochemistry International Conference 2011*, el *Colloquium Spectroscopicum Internationale XLI*, la *10th International Meeting on Photodynamics and Related Aspects*, y el *Atlantic Basin Conference on Chemistry* (en el que participó como plenarista representante de la Sociedad Química de México). El Dr. Peón también forma parte del comité científico permanente de las conferencias Femto, la serie internacional de reuniones más importantes del área de espectroscopía resuelta en tiempo.

La labor de formación de recursos humanos del Dr. Peón también ha sido valiosa. En este rubro se destaca que, al incorporar nuevas líneas de investigación al país, ha dado la oportunidad por primera ocasión a estudiantes mexicanos a desarrollarse en el área de la espectroscopía láser. Un número significativo de sus exalumnos actualmente son profesores o investigadores independientes, tanto en México como en el extranjero. Ha asesorado en total a 9 estudiantes de doctorado, 15 estudiantes de maestría en ciencias y 16 estudiantes de pregrado. Como Profesor de la Facultad de Química ha impartido cursos semestrales de licenciatura de forma ininterrumpida desde su ingreso a la UNAM.

Finalmente, como parte de su labor institucional se destaca su función como Director del Instituto de Química de la UNAM (2014-2022). Durante su gestión, el Instituto vio un incremento de cerca del 80% en su productividad primaria y se duplicó el factor de impacto promedio de las investigaciones de la dependencia. Además, el Instituto se consolidó como la entidad académica con el mayor número de alumnos inscritos en programas de posgrado en química de Latinoamérica. Así mismo, se iniciaron diversas interacciones con el sector privado de la Industria Química, se creó la Unidad de Desarrollo Tecnológico del Instituto, y se iniciaron proyectos internacionales, en los que se destaca la inclusión del Instituto de Química de la UNAM como el décimo nodo del *Berkeley Global Science Institute*, un consorcio dedicado a la colaboración internacional de investigación en Química.