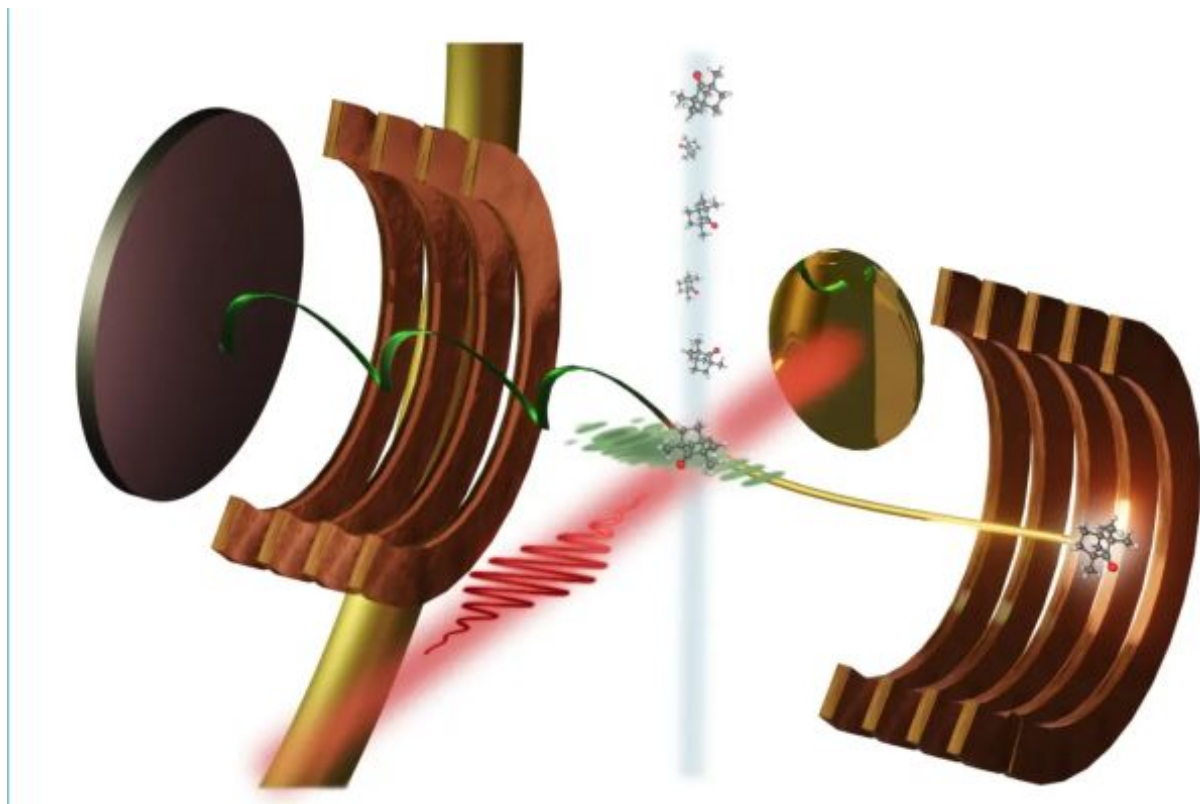




Progres i desafiaments restants en LIED, una tecnica de "selfie molecular"

Investigadors de l'ICFO revisen la difracció d'electrons induïda per laser (LIED, per les seves sigles en anglès), una tècnica d'obtenció d'imatges d'alta resolució que captura l'estructura de molècules individuals en fase gasosa utilitzant un dels seus propis electrons, destacant els seus principals avantatges i limitacions.

September 23, 2024

Les molècules evolucionen i interactuen constantment entre si, adaptant la seva estructura durant el procés. Un dels grans desafiaments de la ciència és visualitzar com les molècules duen a terme aquestes transformacions. Idealment, els científics voldrien localitzar i seguir al llarg del temps la posició de tots els àtoms en una molècula. Però aquesta és una tasca extremadament exigent: aconseguir-ho requeriria tecnologies amb una sensibilitat extraordinària per a detectar molècules individuals i una precisió sense precedents per a mapar els seus àtoms en l'espai i el temps.

La difracció d'electrons induïda per laser (LIED) permet obtenir imatges d'una sola molècula en fase gasosa i localitzar tots els seus àtoms, aconseguint una resolució espacial

excepcional de picometres (10^{-12} metres) i temporal d'attosegons (10^{-15} segons). LIED ha estat ampliament perfeccionada i aplicada amb èxit a l'ICFO, on s'han generat nombrosos resultats importants, la qual cosa destaca el paper prominent de l'institut en l'avancament d'aquesta tècnica d'avantguarda. Recentment, els investigadors de l'ICFO, **Dra. Katharina Chirvi** i el **Prof. ICREA Jens Biegert**, han presentat una revisió exhaustiva de LIED a *Structural Dynamics*. En ella, ofereixen una visió general de la tècnica, des dels seus orígens fins a l'estat actual de la tecnologia, explicant els seus principis físics subjacents i enfocant-se en les seves principals fortaleses i limitacions. **L'article serveix com un recurs valuós per a comprendre l'estat actual de LIED, les seves metodologies i el potencial futur que ofereix per a avançar en la recerca de la dinàmica molecular.**

Principis bàsics, fortaleses i debilitats de LIED

La revisió explica el procés d'obtenció d'imatges amb LIED, que comença amb un pols laser intens enfocat en la molècula en fase gasosa a estudiar. La llum intensa ionitza la molècula, alliberant un electró que inicialment es allunya pel camp elèctric del laser. En un fenomen conegut com a "recol·lisió", l'electró inverteix la seva trajectòria i torna amb el seu ion original dispersant-se en conseqüència. Aquesta dispersió genera un patró de difracció que codifica informació sobre les distàncies interatòmiques de la molècula. Analitzant aquestes dades, LIED reconstrueix l'estructura 3D de la molècula amb resolució de picometres i attosegon, ampliant els límits de la capacitat d'obtenció d'imatges fins al que és físicament possible. **Per tant, en emprar un dels propis electrons de la molècula, la tècnica LIED aconsegueix imatges d'alta qualitat**, que els autors denominen *½selfies moleculars½*. Tanmateix, això no sempre va anar així. En les seves primeres etapes, LIED només podia obtenir imatges de petites molècules diatòmiques lineals i simètriques. Amb el temps, la tècnica va evolucionar per a recuperar estructures moleculars en 2D, i després també en 3D. Avui dia, LIED pot aplicar-se a una varietat de sistemes moleculars, incloent-hi grans estructures complexes que anteriorment eren inaccessibles. No obstant això, l'article emfatitza la importància de complir amb diverses condicions crítiques per a una obtenció d'imatges efectiva, com garantir que l'electró tingui suficient energia d'impacte durant la recol·lisió. Els autors també descriuen diferents implementacions de LIED, cadascuna amb el seu propi conjunt d'avantatges i limitacions, que poden influir en el rendiment i l'aplicabilitat general de la tècnica. De cara al futur, els investigadors destaquen la importància d'estendre la finestra temporal d'observació disponible per a la tècnica, fet que *½permetria aconseguir un somni llargament anhelat pels científics: produir imatges amb resolució atòmica de molècules individuals durant les seves transformacions estructurals½*.

Referència:

Chirvi, J. Biegert; Laser-induced electron diffraction: Imaging of a single gas-phase molecular structure with one of its own electrons. *Struct. Dyn.* 1 July 2024; 11 (4): 041301.

DOI: <https://doi.org/10.1063/4.0000237>

Agraiments:

J.B. acknowledges financial support from the European Research Council for ERC Advanced Grant $\frac{1}{2}$ TRANSFORMER $\frac{1}{2}$ (788218), ERC Proof of Concept Grant $\frac{1}{2}$ miniXi $\frac{1}{2}$ (40010), FETOPEN $\frac{1}{2}$ PETAComi $\frac{1}{2}$ (829153), FET-OPEN $\frac{1}{2}$ OPTOlogici $\frac{1}{2}$ (89794), FET-OPEN $\frac{1}{2}$ TwistedNanoi $\frac{1}{2}$ (101046424), Laserlab-Europe (871124), MINEO for Plan Nacional PID2020-112664 GB-I00; AGAUR for 2017 SGR 1639, MINECO for $\frac{1}{2}$ Severo Ochoai $\frac{1}{2}$ (CEX2019-000910-S), Fundacio Cellex Barcelona, the CERCA programme/Generalitat de Catalunya, and the Alexander von Humboldt Foundation for the Friedrich Wilhelm Bessel Prize.