



## Progreso y desafíos restantes en LIED, una técnica de "selfie molecular"

Investigadores del ICFO revisan la difracción de electrones inducida por láser (LIED, por sus siglas en inglés), una técnica de obtención de imágenes de alta resolución que captura la estructura de moléculas individuales en fase gaseosa utilizando uno de sus propios electrones, destacando sus principales ventajas y limitaciones.

September 23, 2024

Las moléculas evolucionan e interactúan constantemente entre sí, adaptando su estructura durante el proceso. Uno de los grandes desafíos de la ciencia es visualizar cómo las moléculas llevan a cabo estas transformaciones. Idealmente, los científicos quisieran localizar y seguir a lo largo del tiempo la posición de todos los átomos en una molécula. Sin embargo, esta es una tarea extremadamente exigente: lograrlo requeriría tecnologías con una sensibilidad extraordinaria para detectar moléculas individuales y una precisión sin precedentes para mapear sus átomos en el espacio y el tiempo.

La difracción de electrones inducida por láser (LIED) hace posible obtener imágenes de una

sola molécula en fase gaseosa y localizar todos sus átomos, consiguiendo una resolución espacial excepcional de picómetros ( $10^{-12}$  metros) y temporal de attosegundos ( $10^{-18}$  segundos). LIED ha sido ampliamente perfeccionada y aplicada con éxito en el ICFO, generando numerosos resultados importantes, lo que destaca el papel prominente del instituto en el avance de esta técnica de vanguardia. Recientemente, los investigadores del ICFO, **Dra. Katharina Chirvi** y el **Prof. ICREA Jens Biegert** han presentado una revisión exhaustiva de LIED en *Structural Dynamics*. En ella, ofrecen una visión general de la técnica, desde sus orígenes hasta el estado actual de la tecnología, explicando sus principios físicos subyacentes y enfocándose en sus principales fortalezas y limitaciones. **El artículo sirve como un recurso valioso para comprender el estado actual de LIED, sus metodologías y el potencial futuro que ofrece para avanzar en la investigación de la dinámica molecular.**

### **Principios básicos, fortalezas y debilidades de LIED**

La revisión explica el proceso de obtención de imágenes con LIED, que comienza con un pulso láser intenso enfocado en la molécula en fase gaseosa bajo estudio. La luz intensa ioniza la molécula, liberando un electrón que inicialmente es alejado por el campo eléctrico del láser. En un fenómeno conocido como "recolisión", el electrón invierte su trayectoria y regresa con su ion original, dispersándose en consecuencia. Esta dispersión genera un patrón de difracción que codifica información sobre las distancias interatómicas de la molécula. Analizando estos datos, LIED reconstruye la estructura 3D de la molécula con resolución de picómetros y attosegundos, ampliando los límites de la capacidad de obtención de imágenes hasta lo que es físicamente posible.

Por lo tanto, **al emplear uno de los propios electrones de la molécula, la técnica LIED logra imágenes de alta calidad**, que los autores denominan *¿½selfies moleculares¿½*. Sin embargo, esto no siempre fue así. En sus primeras etapas, LIED solo podía obtener imágenes de pequeñas moléculas diatómicas lineales y simétricas. Con el tiempo, la técnica evolucionó para recuperar estructuras moleculares en 2D, y luego también en 3D. Hoy en día, LIED puede aplicarse a una variedad de sistemas moleculares, incluyendo grandes estructuras complejas que anteriormente eran inaccesibles.

El artículo, sin embargo, enfatiza la importancia de cumplir con varias condiciones críticas para una obtención de imágenes efectiva, como garantizar que el electrón tenga suficiente energía de impacto durante la recolisión. Los autores también describen diferentes implementaciones de LIED, cada una con su propio conjunto de ventajas y limitaciones, que pueden influir en el rendimiento y la aplicabilidad general de la técnica. De cara al futuro, los investigadores destacan la importancia de extender la ventana temporal de observación disponible para la técnica, algo que *¿½permitiría alcanzar un sueño largamente anhelado por los científicos: producir imágenes con resolución atómica de moléculas individuales durante sus transformaciones estructurales¿½*

**Referencia:**

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>

**Agradecimientos:**

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