

Image not found

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

Investigadors de l'ICFO revisen la difraccio d'electrons induida per laser (LIED, per les seves sigles en angles), una tecnica d'obtencio d'imatges d'alta resolucio que captura l'estructura de molecules individuals en fase gasosa utilitzant un dels seus propis electrons, destacant els seus principals avantatges i limitacions.

September 23, 2024

Les molecules evolucionen i interactuen constantment entre si, adaptant la seva estructura durant el proces. Un dels grans desafiaments de la ciencia es visualitzar com les molecules duen a terme aquestes transformacions. Idealment, els científics voldrien localitzar i seguir al llarg del temps la posicio de tots els atoms en una molecula. Pero aquesta es una tasca extremadament exigent: aconseguir-ho requeriria tecnologies amb una sensibilitat extraordinaria per a detectar molecules individuals i una precisió sense precedents per a mapar els seus atoms en l'espai i el temps.

La difraccio d'electrons induida per laser (LIED) permet obtenir imatges d'una sola molecula en fase gasosa i localitzar tots els seus atoms, aconseguint una resolucio espacial excepcional de picometres (10^{-12} metres) i temporal d'attosegons (10^{-18} segons). LIED ha estat ampliament perfeccionada i aplicada amb exit 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 tecnica d'avantguarda. Recentment, els investigadors de l'ICFO, **Dra. Katharina Chirvi** i el **Prof. ICREA Jens Biegert**, han presentat una revisio exhaustiva de LIED a Structural Dynamics. En ella, ofereixen una visio general de la tecnica, des dels seus orogens fins a l'estat actual de la tecnologia, explicant els seus principis fisics 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 dinamica molecular.**

Principis basics, fortaleses i debilitats de LIED

La revisio explica el proces d'obtencio d'imatges amb LIED, que comença amb un pols laser intens enfocant-se en la molecula en fase gasosa a estudiar. La llum intensa ionitza la molecula, alliberant un electro que inicialment es allunyat pel camp electric del laser. En un fenomen conegut com a "recol·lisió", l'electro inverteix la seva trajectoria i torna amb el seu io 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 picòmetres i atòssegons, 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 *selfies* moleculars. 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'electrotingui suficient energia d'impacte durant la recollida. 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 permetria aconseguir un somni llargament anhelat pels científics: produir imatges amb resolució atòmica de molècules individuals durant les seves transformacions estructurals.

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 *TRANSFORMER* (788218), ERC Proof of Concept Grant *miniX* (40010), FETOPEN *PETACOMI* (829153), FET-OPEN *OPTOLOGICI* (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), Fundació Cellex Barcelona, the CERCA programme/Generalitat de Catalunya, and the Alexander von Humboldt Foundation for the Friedrich Wilhelm Bessel Prize.