



Mostratge intel·ligent per a l'espectroscopia en el domini del temps

Un equip d'investigadors explora com l'espectroscopia en el domini del temps es pot beneficiar d'un sistema de mostreig ben dissenyat. L'estrategia proposada redueix molt els temps d'adquisició i alhora preserva el contingut de la informació espectroscòpica.

June 11, 2024

L'espectroscòpia òptica es troba al nucli de la interacció llum-materia. Actualment, l'espectroscòpia ultraràpida moderna utilitza molt sovint lasers de banda ampla amb un retard al pols que després s'escaneja en el domini del temps. Aquest camp de recerca, anomenat espectroscòpia en el domini del temps, troba aplicacions en la caracterització de materials (que, alhora, pot ser rellevant per a àrees tan diverses com la química, la biologia o l'energia), l'increment de precisió en sensors o la classificació molecular, entre d'altres. En general, cal mostrejar una quantitat considerable de passos de temps en un rang temporal

prou llarg per a poder capturar la resposta espectral en la seva totalitat. Com més gran sigui el nombre de mostres, més precisa serà la reconstrucció. Com a desavantatge, augmentar aquest nombre requereix que els temps d'adquisició de dades siguin més llargs, cosa que es pot tornar experimentalment inviable, especialment en espectroscopies multidimensionals més complexes. Per sorprenent que pugui semblar, s'ha parat poca atenció a l'estratègia de mostreig dins del camp de l'espectroscopia, on habitualment es tendeixen a considerar només distribucions uniformes o aleatòries.

Ara, amb l'objectiu de recopilar dades de forma més eficaç, els investigadors de l'ICFO, el **Dr. Luca Bolzonello** i el **Prof. ICREA Niek van Hulst**, juntament amb Andreas Jakobsson de la Universitat de Lund, han introduït un **enfocament sistemàtic per optimitzar el sistema de mostreig en experiments d'espectroscopia en el domini del temps**. Els resultats, publicats a *The Journal of Chemical Physics*, mostren com, en clar contrast amb la ineficiència dels mètodes de mostreig tradicionals, la seva tècnica pot reduir significativament el temps d'adquisició mantenint o fins i tot millorant la qualitat de les dades recopilades.

Segons el Dr. Luca Bolzonello, primer autor de l'article, "aquesta optimització no només estalvia temps, sinó que també redueix costos, minimitza la degradació de la mostra i millora l'eficiència general de les configuracions experimentals".

Optimitzant el mètode de mostreig

L'objectiu de l'estudi era trobar l'equilibri entre obtenir la màxima informació possible i realitzar el mínim nombre d'adquisicions de dades. El mètode proposat aprofita el coneixement previ de l'espectroscopista que realitza l'experiment per optimitzar el mecanisme de mostreig, ja que aquest coneixement preliminar evita la recopilació de dades sorolloses amb contingut d'informació baix.

Més tècnicament, els investigadors utilitzen l'anomenada informació de Fisher. En termes generals, la matriu de paràmetres de Fisher quantifica quant es pot aprendre sobre un paràmetre en funció del sistema de mostreig escollit i el soroll de l'experiment. $i\frac{1}{2}$ Resulta que això permet estimar la incertesa final de les mesures fins i tot abans de dur-les a terme $i\frac{1}{2}$, explica Bolzonello. $i\frac{1}{2}$ En centrar-nos en els punts més informatius, podem reduir la quantitat de mostres necessàries i alhora obtenir estimacions de paràmetres exactes i precises. Aquest enfocament millora sistemàticament la qualitat de les dades recopilades, fent que els experiments siguin més eficients i informatius $i\frac{1}{2}$. La tècnica es va posar en pràctica en diversos casos d'estudi, fet que demostra el seu potencial per beneficiar la investigació espectroscòpica. Ara l'equip planeja implementar aquesta estratègia de mostreig optimitzada en una gamma més àmplia d'experiments espectroscòpics per tal de validar-ne l'efectivitat en diferents aplicacions. En particular, la classificació de senyals fluorescents, la caracterització de materials i l'estudi de la dinàmica molecular ultraràpida són les àrees que més se'n beneficien.

Referencia bibliografica:

Bolzonello L, van Hulst NF, Jakobsson A. Fisher information for smart sampling in time-domain spectroscopy. J Chem Phys. 2024 Jun 7;160(21):214110. doi: <https://doi.org/10.1063/5.0206838>