

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'adquisicio i alhora preserva el contingut de la informacio espectroscopica.

June 11, 2024

L'espectroscopia optica es troba al nucli de la interaccio llum-materia. Actualment, l'espectroscopia ultrarapida moderna utilitza molt sovint lasers de banda ampla amb un retard al pols que despres s'escaneja en el domini del temps. Aquest camp de recerca, anomenat espectroscopia en el domini del temps, troba aplicacions en la caracteritzacio de materials (que, alhora, pot ser rellevant per a arees tan diverses com la quimica, la biologia o l'energia), l'increment de precisio en sensors o la classificacio 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 mes gran sigui el nombre de mostres, mes precisa sera la reconstruccio. Com a desavantatge, augmentar aquest nombre requereix que els temps d'adquisicio de dades siguin mes llargs, cosa que es pot tornar experimentalment inviable, especialment en espectroscopies multidimensionals mes complexes. Per sorprenent que pugui semblar, s'ha parat poca atencio a l'estrategia de mostreig dins del camp de l'espectroscopia, on habitualment es tendeixen a considerar nomes distribucions uniformes o aleatories.
Ara, amb l'objectiu de recopilar dades de forma mes eficac, 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 introduit un **enfocament sistematic 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 ineficiencia dels metodes de mostreig tradicionals, la seva tecnica pot reduir significativament el temps d'adquisicio mantenint o fins i tot millorant la qualitat de les dades recopilades.
Segons el Dr. Luca Bolzonello, primer autor de l'article, "aquesta optimitzacio no nomes estalvia temps, sino que tambe redueix costos, minimitza la degradacio de la mostra i millora l'eficiencia general de les configuracions experimentals".

Optimitzant el metode de mostreig
L'objectiu de l'estudi era trobar l'equilibri entre obtenir la maxima informacio possible i realitzar el minim nombre d'adquisicions de dades. El metode 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 recopilacio de dades sorolloses amb contingut d'informacio baix.
Mes tecnicament, els investigadors utilitzen l'anomenada informacio de Fisher. En termes generals, la matriu de parametres de Fischer quantifica quant es pot aprendre sobre un parametre en funcio del sistema de mostreig escollit i el soroll de l'experiment. i¿½Resul a que aixo permet estimar la incertesa final de les mesures fins i tot abans de dur-les a termei¿½, explica Bolzonello. i¿½En centrar-nos en els punts mes informatius, podem red ir la quantitat de mostres necessaries i alhora obtenir estimacions de parametres exa tes i precises. Aquest enfocament millora sistematicament la qualitat de les dades recopi ades, fent que els experiments siguin mes eficients i informati si¿½. La tecnica es va posar en practica en diversos casos d'estudi, fet que demostr el seu potencial per beneficiar la investigacio espectroscopica. Ara l'equip planeja imp ementar aquesta estrategia de mostreig optimitzada en una gamma mes amplia d'exp riments espectroscopics per tal de validar-ne l'efectivitat en diferents aplicacions. En partic lar, la classificacio de senyals fluorescents, la caracteritzacio de materials i l'estudi de la inamica molecular ultrarapida son les arees que mes se'n benef

ICFO

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