



Muestreo inteligente para la espectroscopia en el dominio del tiempo

Un equipo de investigadores explora como la espectroscopia en el dominio del tiempo puede beneficiarse de un sistema de muestreo bien diseñado. La estrategia propuesta reduce en gran medida los tiempos de adquisicion y al mismo tiempo preserva el contenido de la informacion espectroscopica.

June 11, 2024

La espectroscopia optica se encuentra en el nucleo de la interaccion luz-materia. Actualmente, la espectroscopia ultrarrapida moderna utiliza muy a menudo lasers de banda ancha con un retardo en el pulso que luego se escanea en el dominio del tiempo. Este campo de investigacion, denominado espectroscopia en el dominio del tiempo, encuentra aplicaciones en la caracterizacion de materiales (que, a su vez, puede ser relevante para areas tan diversas como la quimica, la biologia o la energia), el incremento de precision en sensores o la clasificacion molecular, entre otras.

En general, es necesario muestrear una cantidad considerable de pasos de tiempo en un rango temporal lo suficientemente largo como para poder capturar la respuesta espectral en su totalidad. Cuanto mayor sea el número de muestras, más precisa será la reconstrucción. Como desventaja, aumentar este número requiere que los tiempos de adquisición de los datos sean más largos, algo que puede volverse experimentalmente inviable, especialmente en espectroscopias multidimensionales más complejas. Por sorprendente que pueda parecer, se ha prestado poca atención a la estrategia de muestreo dentro del campo de la espectroscopia, donde habitualmente se tienden a considerar tan solo distribuciones uniformes o aleatorias.

Ahora, con el objetivo de recopilar datos de forma más eficaz, los investigadores del ICFO, el **Dr. Luca Bolzonello** y el **Prof. ICREA Niek van Hulst**, junto con Andreas Jakobsson de la Universidad de Lund, han introducido un **enfoque sistemático para optimizar el sistema de muestreo en experimentos de espectroscopia en el dominio del tiempo**. Los resultados, publicados en *The Journal of Chemical Physics*, muestran como, en marcado contraste con la ineficiencia de los métodos de muestreo tradicionales, su técnica puede reducir significativamente el tiempo de adquisición manteniendo o incluso mejorando la calidad de los datos recopilados.

Según el Dr. Luca Bolzonello, primer autor del artículo, "esta optimización no solo ahorra tiempo, sino que también reduce costes, minimiza la degradación de la muestra y mejora la eficiencia general de las configuraciones experimentales".

Optimizando el método de muestreo

El objetivo del estudio era encontrar el equilibrio entre obtener la máxima información posible y realizar el mínimo número de adquisiciones de datos. El método propuesto aprovecha el conocimiento previo del espectroscopista que realiza el experimento para optimizar el mecanismo de muestreo, ya que este conocimiento preliminar evita la recopilación de datos ruidosos con bajo contenido de información.

Más técnicamente, los investigadores utilizan la llamada información de Fisher. En términos generales, la matriz de parámetros de Fisher cuantifica cuánto se puede aprender sobre un parámetro en función del sistema de muestreo elegido y el ruido del experimento. *¿½* Resulta que esto permite estimar la incertidumbre final de las mediciones incluso antes de realizarlas *¿½*, explica Bolzonello. *¿½* Al centrarnos en los puntos más informativos, podemos reducir la cantidad de muestras necesarias y al mismo tiempo obtener estimaciones de parámetros exactas y precisas. Este enfoque mejora sistemáticamente la calidad de los datos recopilados, haciendo que los experimentos sean más eficientes e informativos *¿½*. La técnica se puso en práctica en varios casos de estudio, lo que demuestra su potencial para beneficiar la investigación espectroscópica. Ahora el equipo planea implementar esta estrategia de muestreo optimizada en una gama más amplia de experimentos espectroscópicos para validar su efectividad en diferentes aplicaciones. En partic

lar, la clasificación de señales fluorescentes, la caracterización de materiales y el estudio de la dinámica molecular ultrarrápida son las áreas que más se benef

Referencia bibliográfica:

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>