

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 disenado. 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 laseres 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 numero de muestras, mas precisa sera la reconstruccion. Como desventaja, aumentar este numero requiere que los tiempos de adquisicion de los datos sean mas largos, algo que puede volverse experimentalmente inviable, especialmente en espectroscopias multidimensionales mas complejas. Por sorprendente que pueda parecer, se ha prestado poca atencion 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 mas 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 sistematico 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 metodos de muestreo tradicionales, su tecnica puede reducir significativamente el tiempo de adquisicion manteniendo o incluso mejorando la calidad de los datos recopilados.

Segun el Dr. Luca Bolzonello, primer autor del articulo, "esta optimizacion no solo ahorra tiempo, sino que tambien reduce costes, minimiza la degradacion de la muestra y mejora la eficiencia general de las configuraciones experimentales".

Optimizando el metodo de muestreo

El objetivo del estudio era encontrar el equilibrio entre obtener la maxima informacion posible y realizar el minimo numero de adquisiciones de datos. El metodo propuesto aprovecha el conocimiento previo del espectroscopista que realiza el experimento para optimizar el mecanismo de muestreo, ya que este conocimiento preliminar evita la recopilacion de datos ruidosos con bajo contenido de informacion.

Mas tecnicamente, los investigadores utilizan la llamada informacion de Fisher. En terminos generales, la matriz de parametros de Fischer cuantifica cuanto se puede aprender sobre un parametro en funcion del sistema de muestreo elegido y el ruido del experimento. i¿½Resul a que esto permite estimar la incertidumbre final de las mediciones incluso antes e realizarlasi¿½, explica Bolzonello. i¿½Al centrarnos en los puntos mas informativos, p demos reducir la cantidad de muestras necesarias y al mismo tiempo obtener estimacio es de parametros exactas y precisas. Este enfoque mejora sistematicamente la calidad de los datos recopilados, haciendo que los experimentos sean mas eficientes e informativ si¿½. La tecnica se puso en practica en varios casos de estudio, lo que demuestra su p tencial para beneficiar la investigacion espectroscopica. Ahora el equipo planea implemen ar esta estrategia de muestreo optimizada en una gama mas amplia de expe imentos espectroscopicos para validar su efectividad en diferentes aplicaciones. En partic

lar, la clasificacion de senales fluorescentes, la caracterizacion de materiales y el estud
o de la dinamica molecular ultrarrapida son las areas que mas se benef

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