

APLICACIÓN DE LA INSTRUMENTACIÓN ALTERNATIVA PARA CLASIFICACIÓN DE PRODUCTOS POR HUELLA ESPECTROMÉTRICA

Aurelio Arbildo López, Eduardo Montoya Rossi

Como parte del uso de la instrumentación científica alternativa, sobre un prototipo inicial de espectrómetro Raman de fabricación propia, construido con componentes de fácil adquisición y bajo costo –como un puntero láser verde, lentes comunes, cámara fotográfica y otros componentes menores–, se han hecho mejoras sustantivas del prototipo. Para la aplicación prevista de esta tecnología en la clasificación de muestras, usando los espectros Raman y de fluorescencia, se han evaluado varias técnicas de clasificación y se han desarrollado rutinas de *software* que incluyen la captura y conversión de las imágenes en formato de alta resolución y su procesamiento masivo, la integración de los datos de imagen en espectros y su almacenamiento.

Para satisfacer las exigencias de las técnicas de clasificación, se ha rediseñado radicalmente la óptica para simplificarla y tener un aparato bastante compacto y estable en largos periodos. Entre las modificaciones realizadas está la sustitución de un conjunto de lentes separados por componentes comerciales que coliman y reenfochan el haz de luz que contiene la información generada en las muestras, sobre una fibra óptica de diámetro pequeño que ingresa a la cámara de descomposición de luz construida mediante impresión 3D. La concepción del diseño original que colectaba los

fotones a 90° del haz que incide sobre la muestra ha sido rediseñada para colectar los fotones a 180° , lográndose un incremento importante en la eficiencia, toda vez que, en un mismo ángulo sólido, ahora se colecta información de más puntos de interacción. Se incluyeron filtros para eliminar longitudes de onda indeseables de la fuente láser de bajo costo y se mejoró la medición a bajos desplazamientos; asimismo, se incluyeron filtros adicionales para filtrar los fotones de excitación de los fotones Raman. Las mejoras han permitido colectar suficiente información, lo cual muestra que el diseño tiene alta *performance* y muy buena estabilidad a un costo relativamente bajo, en comparación con los equipos comerciales. Los resultados han sido publicados en el *Journal of Laboratory Chemical Education*, en la edición del último trimestre de 2015.

De las técnicas de clasificación ensayadas, los investigadores se han concentrado en los métodos estadísticos multivariados de componentes principales, usando el espectro completo como huella digital para la clasificación. Para mejorar el desempeño de la metodología, se ha desarrollado una serie de rutinas de *software* de soporte para la automatización de los análisis, el tratamiento masivo de datos y las metodologías de clasificación. Como avances metodológicos basados en *software* podemos mencionar, entre otros, la recuperación de datos de formatos de alta resolución, la mezcla de espectros a tres focalizaciones diferentes para mejorar la resolución, la implantación de filtros de correlación para mejorar la relación señal-ruido, los filtros de ajuste de resolución, así como ensayos preliminares de separación de la componente de fluorescencia de la componente Raman. Se ha hecho una variedad de mediciones sobre muestras puras y mezclas de estas, tanto para caracterizar el instrumento como para generar información para las pruebas de clasificación ensayadas. ❖

De las técnicas de clasificación ensayadas, los investigadores se han centrado en los métodos estadísticos multivariados de componentes principales, usando el espectro completo como huella digital para la clasificación.

Ph.D. en Ingeniería por la Universidad de Nuevo México

✉ aarbildo@ulima.edu.pe

Doctor en Ciencias por la Universidad de Amberes, Bélgica

✉ emontoya@ipen.gob.pe