

NANO-INFORMÁTICA Y MODELACIONES PARA DIVULGAR LAS NANO-CIENCIAS

NANO-INFORMATICS AND MODELING FOR PROMOTING THE NANO-SCIENCES

David Quesada

School of Science, Technology, and Engineering Management, St. Thomas University, Miami Gardens,
FL 33054 USA

(Recibido: Noviembre/2016. Aceptado: Enero/2017)

Resumen

Esta comunicación intenta promover una idea que ha ido creciendo en popularidad y reconocimiento dentro de la comunidad de ciencia de materiales, la informática de ciencia de materiales, como una opción de integración entre las nano-ciencias y las demandas del mercado en el manejo y análisis de datos, conocido en inglés como data analytics. Las técnicas de aprendizaje computacional, minado de datos, y redes complejas han permitido representar la evolución termodinámica de aleaciones y compuestos y a partir de ese aprendizaje, se han pronosticado nuevos compuestos y aleaciones. A continuación, se muestran las ideas fundamentales de tal integración y cómo pueden ser aplicadas a materiales superconductores y de interés a la industria fotovoltaica.

Palabras Clave: Programas de estudios, Nano-ciencias, Informática, Manejo de datos, Nano-informática, Modelación, Integración disciplinaria.

Abstract

This communication intends promoting the materials science informatics, an idea that has been growing in popularity and recognition among materials scientists. It constitutes an option to integrate the nano-sciences with the market demands on data analytics skills and applications. Techniques as machine learning, data mining, and complex networks have allowed representing the thermodynamic evolution of existing alloys and compounds, from whom, new compounds have been predicted and created. In what follows, the main ideas of the nano-informatics are formulated and how the above-mentioned integration can be accomplished. Besides that, its

application to superconductors and materials of interest for the photovoltaic industry is discussed.

Keywords: Academic programs, Nano-sciences, Informatics, Data analytics, Nano-informatics, Academic integration.

1. Introducción

Las sociedades modernas disfrutan cada vez más de los avances tecnológicos que son un resultado directo de las investigaciones en ciencia de materiales [1]. Este desarrollo ha ido acompañado también por una generación casi exponencial de información en todos los sectores de la sociedad y el aumento continuo del conocimiento tecnológico, científico y social [2–5]. Paradójicamente, también se evidencia un creciente deterioro de las condiciones medio ambientales a escalas globales y un impacto negativo a la biodiversidad [6].

El diseño de materiales con propiedades específicas es uno de los mayores retos de la ciencia de materiales en la actualidad. Los nano-materiales se ubican dentro de las primeras posiciones debido a sus peculiares propiedades físico-químicas. Tal denominación ha estado asociada con que sus dimensiones geométricas están en el rango de los nanómetros, es decir una mil millonésima de un metro, o una millonésima de un milímetro. Tal definición aunque da una idea, deja por fuera aspectos importantes del interés de la comunidad de ciencias de materiales en ellos: el primero, reside en la relación área superficial al volumen ocupado, el segundo concierne al confinamiento cuántico [7-9]. A medida que hacemos los cuerpos más pequeños la relación área superficial al volumen crece en varios factores de potencia. Esto conduce a una mayor reactividad y de ahí su utilidad en catálisis y en aplicaciones donde el área de contacto sea de suma importancia. Al mismo tiempo, al disminuir las escalas, cuando el tamaño característico de las partículas se hace cercano o menor que la longitud de De Broglie, la descripción del mundo se vuelve cuántica, con comportamientos muy diferentes a los observados en el macro mundo. Así que, los nano-materiales son aquellos cuyas dimensiones se hacen comparables o menores a la longitud de De Broglie con ellos asociados y que, por su relación área superficial al volumen característica, amplifican los efectos cuánticos y su reactividad. Ahora bien, como la masa de las nano-partículas dependiendo de la composición química varía, así también variarán los valores de la longitud de De Broglie y por consiguiente, el rango de los nano-materiales puede ir desde los sub-nanómetros hasta unos cientos de nanómetros.

La universidad de St. Thomas tiene sus raíces en Cuba, donde fue fundada en 1946 por frailes Agustinos y después de 1959 se trasladó a la ciudad de Miami donde comenzó a operar inicialmente como el Colegio de Biscayne y más tarde, en el 1984, recobra su antiguo nombre y status como entidad privada católica [10]. La institución sirve mayoritariamente a una población hispana, sin excluir otros grupos étnicos y corrientes religiosas. La matrícula oscila entre los 2500 y 3000 estudiantes, de los cuales entre 200 y 250 se alistan en carreras de ciencias. Nótese, que el porcentaje de estudiantes enlistados en ciencias básicas es alrededor del 10 %. Dentro de las ciencias, la Biología es la de mayor demanda, seguida por Química y Ciencias de la Computación. Por cada estudiante de Química, hay 5 de Biología, y por cada de Computación hay entre 6 y 7 de Biología. El programa de Matemática Aplicada cuenta con muy pocos estudiantes y su relación con Biología oscila entre 8 y 10. La escuela ofrece además especializaciones menores en dichos campos y además en Física, que pueden ser combinados con las carreras de cuatro años. Adicionalmente y en combinación con la Universidad Internacional de la Florida (FIU) existe un programa de Pre-Ingeniería, donde los estudiantes cursan las ciencias básicas en St. Thomas y se transfieren a la FIU.

En esta comunicación nos adentramos en los retos que enfrentan nuestros planes de estudios en relación a la introducción de los temas de nanotecnología y la ciencia de los nano-materiales, así como la evaluación de, cómo los modelos educativos actuales pudieran incorporar los avances en este campo sin desestimar el valor de otros conocimientos generales e integrarlos con programas existentes cuando cursos explícitos no puedan ser introducidos. Se plantean las siguientes interrogantes: (1) ¿Cómo elaborar estrategias que muestren el valor de las nano-tecnologías y el interés por su conocimiento aun en condiciones no muy favorables para su promoción?, (2) ¿Cómo la misma puede insertarse en los programas que se promueven actualmente en universidades con restricciones en número de créditos y programas a ofrecer? y (3) ¿Qué se puede hacer para generar temas interdisciplinarios integradores, que, en un futuro, garanticen una mejor acogida a estas tecnologías emergentes?

En este empeño se trata de: (1) evitar un efecto de “cuello de botella”, donde la cantidad de información a procesar sea mayor que la capacidad de los involucrados en absorberla y procesarla, (2) integrar conceptos y aplicaciones de manera que, los números de créditos y su variedad académica mantengan la integridad de los programas de estudios existentes, (3) tomar en cuenta el ecosistema educativo existente, donde el espectro de instituciones varía tanto en número de estudiantes, como en las prioridades

de las instituciones (académico-investigativas, técnica-vocacionales, enseñanza liberal, universidades públicas y privadas).

2. Marco teórico-conceptual.

Tradicionalmente la búsqueda de nuevos materiales con propiedades físicas y químicas específicas se ha realizado mediante la solución de problemas de auto-valor para un modelo de interacciones cristalinas asumido a-priori y la siguiente aplicación de métodos de la física estadística, en aras de minimizar la energía y encontrar cuál es la configuración más estable [12] (un resumen en Fig. 1).

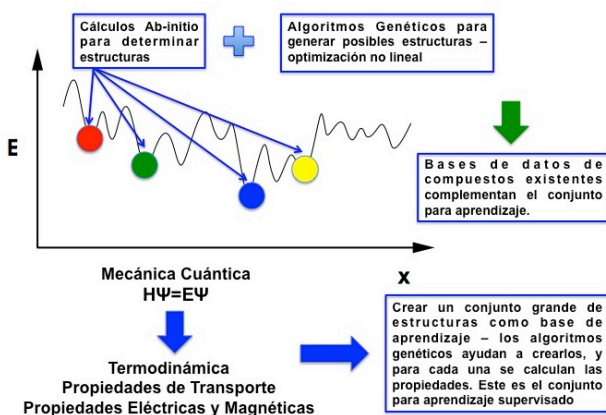


FIGURA 1. Descripción de como la búsqueda de nuevas estructuras se realiza con ayuda del aprendizaje de máquina.

Esta metodología que parte de primeros principios en ocasiones se vuelve un problema computacionalmente poco eficiente y de difícil representación física. Si agregamos la dificultad en la parametrización de las interacciones de muchos cuerpos, nos encontramos con situaciones poco operacionales, que son necesarias cuando el tiempo de computo no puede extenderse demasiado. Estas técnicas se han ido combinando con métodos de optimización, como son los algoritmos genéticos, y han producido resultados de bastante calidad y fiabilidad. Por otra parte, los avances en el campo de la bio-informática, la informática de la salud y el análisis de datos han creado un escenario propicio para evaluar cuanto pueden aportar estas nuevas técnicas en otros campos. En ese sentido, la Fundación Nacional para las Ciencias de EUA lanzó el proyecto “El Gen de Materiales” [12] y con él, dió inicio al programa de la nano-informática [13].

La idea del proyecto es utilizar la experiencia acumulada en la Biología de Sistemas, donde partiendo del Genoma y considerando los “omas” intermedios se trata de predecir los fenotipos y comportamientos biológicos a escalas macroscópicas donde muchas células participan [14,15]. En la Biología de Sistemas [14,15] se parte de la inmensa sistematicidad acumulada y por métodos estadísticos se elaboran modelos de predicción de propiedades a partir de variables predictores que pueden estar relacionadas con las estructuras espaciales, los tipos de moléculas y átomos presentes en los compuestos y tejidos biológicos, etc. Esto permitió desarrollar métodos computacionales en Química que combinaban la estadística, la minería de datos, y las técnicas de aprendizaje computacional y optimización (algoritmos genéticos, redes neurales, redes de Bayes por citar algunas). Tal aproximación recibió el nombre de QSAR/QSPR (Quantitative Structure Activity Relationships/Quantitative Structure Property Relationships) en inglés [16-18]. Era de esperar que, con los logros obtenidos en la Química Computacional, los nuevos métodos pudieran ser extendidos a aleaciones y compuestos sólidos, incluyendo los nano-materiales y nano-composites [21-36].

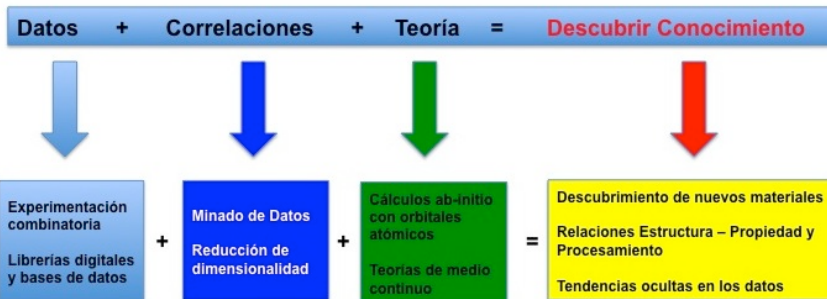


FIGURA 2. Representación esquemática de la integración de temas para el desarrollo de la informática de materiales. Nótese la combinación de métodos de Análisis y Gestión de Datos con cálculos basados en Mecánica Cuántica, Estadística y Teoría del Medio Continuo. Estos últimos se utilizan como mecanismos de aprendizaje supervisado [19,20].

En resumen, la **nano-informática** es la ciencia y la actividad práctica de determinar qué tipo de información es relevante para las nano-ciencias y las ingenierías, para entonces, desarrollar e implementar los mecanismos efectivos de adquirir, validar, guardar, compartir, analizar, modelar y aplicar dicha información (ver resumen en Fig. 2). Dos resultados muy notables pueden verse en las referencias [31-34] enfocadas respectivamente, en la búsqueda de nuevos materiales superconductores y nuevos materiales con brechas energéticas favorables para su uso en la industria fotovoltaica.

3. Resultados de la Integración de disciplinas.

La implementación de esta idea dentro de nuestra escuela ha ocurrido en varias etapas: 1. Introducción de las nano-ciencias desde la Química y la Física en los cursos introductorios donde, se discuten los temas de escalas y dimensiones, 2. Desde la Química se tocan aquellas propiedades que tienen un origen químico (reactividad, catálisis, luminiscencia) y desde la Física se discuten temas como tribología o nano-fricción, propiedades elásticas de nano-composites, suspensión en fluidos, y coberturas protectoras. Cada uno de estos temas se inserta como un subtema en el capítulo a discutir de acuerdo al plan de estudio de la clase.



FIGURA 3. Modelos educativos a base de Lego han sido utilizados para mostrar lo que es un Microscopio Túnel de Barrido y como el mismo representa una superficie. Un segundo recurso es la incorporación de la robótica para el control de procesos (en este caso de microscopia) y nuevamente Lego-robots han sido utilizados. En el panel de la izquierda se muestra modelos de estructura química.

Cabe señalar que aunque en Física Moderna se introducen los conceptos de Mecánica Cuántica, en la mayoría de los colegios con una estructura similar al nuestro, los estudiantes conocen del mundo atómico solo a través de la Química. Los estudiantes que toman cursos más avanzados de Química se benefician de los cursos de Química Física Básica y Química Analítica donde se insertan más horas de discusión. A través de los cursos de Química, es que los estudiantes de Biología empiezan a conocer sobre nano-ciencias y algunas ideas sobre nano-medicina.

Un segundo camino explorado ha sido la modelación matemática de sistemas nano-estructurados y propiedades dinámicas de los mismos. En ese sentido, los cursos de Ecuaciones Diferenciales y de Introducción a la Modelación han jugado un papel importante. Proyectos que incluyen sistemas dinámicos y caos en juntas semiconductoras y juntas Josephson superconductoras, movimiento de nano-partículas suspendidas en un fluido, así como problemas mecano-cuánticos que son reducibles a búsquedas de auto-valores en una dimensión son algunos de los tratados

para cumplir una doble función, aprender métodos matemáticos y a la vez conectar los mismos con el aprendizaje de nano-ciencias. Los estudiantes son expuestos a tres sistemas de programación, los lenguajes Wolfram y Python y el programa R para estadística. El lenguaje Wolfram [37] está vinculado al programa de cálculo Mathematica, y brinda al estudiante la posibilidad de iniciarse rápidamente en el mundo de la programación computacional. Otra opción que les brinda el lenguaje Wolfram a los estudiantes es el acceso al Wolfram Demonstration Project, un compendio de más de un millar de aplicaciones puestas a disposición pública. Cabe mencionar, que el acceso al Mathematica puede hacerse también a través de la nube de forma libre usando Wolfram Cloud. Por su parte, Python y R son dos de la plataformas por excelencia para trabajos con manejo de datos y aprendizaje computacional. El lenguaje Python [38] además posee una librería de aplicaciones para Ciencia conocida con SciPy que facilita los cálculos numéricos. Otra ventaja del lenguaje Python es que es un proyecto comunitario y de libre acceso. En esa misma dirección se alista el programa R para aplicaciones relacionadas con estadística y su interface gráfica de excelencia, el RStudio [39].

Una tercera avenida que ha empezado a explorarse es el vínculo de la nano-informática y el aprendizaje de máquina. Debido a que la escuela ha mostrado un marcado interés en promover los estudios sobre gestión y minería de datos, una colaboración entre el programa de Ciencias de la Computación y Matemática ha permitido incluir la nano-informática como uno de los proyectos pilotos donde aplicar estas herramientas. En este sentido, tres proyectos han ido ganando cuerpo: Uno dirigido a la búsqueda de nuevos materiales superconductores usando las bases de datos existentes y apoyado en las ideas de los trabajos [32-34], un segundo orientado a la búsqueda de nuevos compuestos para celdas fotovoltaicas a base de puntos cuánticos y un tercer proyecto dirigido a la búsqueda de materiales con fines de diagnóstico y terapéutica a la vez, para ser usados en la batalla contra el cáncer, un campo conocido como nano-teranóstica (palabra que es una combinación de nano-tecnología, terapia y diagnóstico) [35,36]

La cuarta opción es a través de temas de investigación de los profesores de plantilla, que en ocasiones, ha sido posible trasladar a los cursos del programa de estudio. Por ocho años consecutivos, la escuela ha organizado internados de investigación de verano, donde proyectos asociados con las nano-ciencias han estado presentes. En esa dirección, en la Fig. 4 se muestra una parte de las líneas de investigación y su mapa de conexiones con cursos ofrecidos por la escuela.

Integración de los temas de Investigación

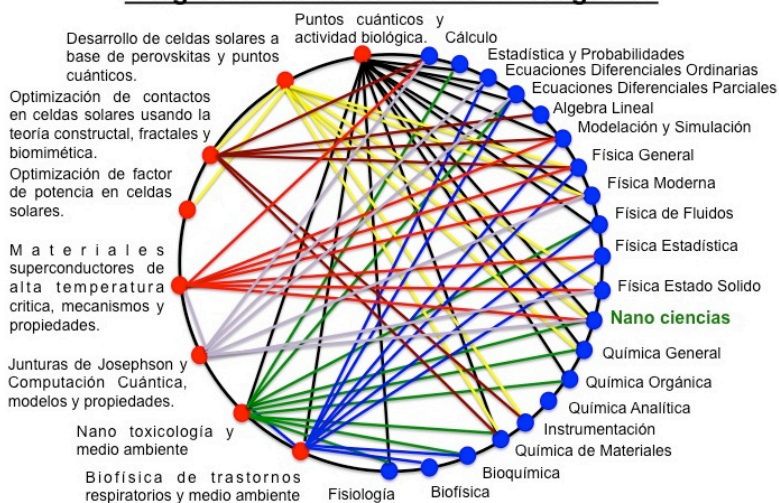


FIGURA 4. Representación esquemática de la integración de temas de investigación con cursos del programa de pre-grado donde la inserción de las nano-ciencias permite su difusión y discusión de acuerdo a necesidades concretas.

En resumen, la divulgación de las nano-ciencias en nuestra escuela ha seguido un camino percolativo, aprovechando espacios y momentos. Una extensión de estas ideas y en proceso de maduración es el proyecto **RIDE** por sus siglas en inglés (**R**esearch – **I**nnovation – **D**evelopment – **E**ntrepreneurship) - “take a RIDE with St. Thomas”, donde se intentará que el estudiante vea la cadena desde el desarrollo tecnológico hasta la creación de un producto, cómo mercaderarlo y cómo gestionar tecnonegocios. Este proyecto serviría como un tipo de semillero (incubadora tecnológica) dentro del movimiento de emprendedores ya existente en el área de Miami y conocido como **e-Merge America**.

4. Conclusiones

Las nano-ciencias han llegado para quedarse, sin embargo su divulgación en la sociedad está transitando un camino percolativo y esa inserción no está ocurriendo de igual manera en todos los lugares. Dicha inserción demanda de los educadores creatividad para sortear obstáculos, tanto de índole administrativo como cultural. La Escuela de Ciencias de la Universidad de St. Thomas ha encontrado vías que se ajustan tanto a la disponibilidad de tiempo como de recursos tanto humanos como instrumentales.

Agradecimientos

El autor agradece a la Universidad de St. Thomas por el auspicio y fondos para la participación en NANODYF 2016, así como a la red NANODYF por su apoyo para la participación en este evento. Además, se agradece el aporte del proyecto STEM-TRAC PO3C110190 por el financiamiento parcial para la adquisición de instrumentación básica para promover las nano-ciencias.

Referencias

- [1] W.D. Callister and D.G. Rethwisch, *Materials science and engineering, an introduction*, 9th edition, Wiley, (2014).
- [2] D. Helbing, *Thinking ahead – Essays on Big Data, Digital Revolution, and Participatory Market Society*, Chapter 7, Springer, Berlin (2015).
- [3] J.Q. Fan, F. Han, and H. Liu, *Nat. Science Rev.* **1**, 293 – 314 (2014).
- [4] L. Einav and J. Levin, *Science* **346**, 1243089 (2014).
- [5] M. Hilbert and P. Lopez, *Science* **332**, 60 – 65 (2011).
- [6] WMO Statement on the Status of the Global Climate in 2015, WMO (2016).
- [7] M. Kuno, *Introductory Nanoscience: Physical and Chemical Concepts*, Garland Science, London and New York (2012).
- [8] S.M. Lindsay, *Introduction to Nanoscience*, Oxford Univ. Press (2010).
- [9] C. Binns, *Introduction to Nanoscience and Nanotechnology*, Wiley (2010).
- [10] St. Thomas Fact book, <http://web.stu.edu/Portals/0/OIR/FB2015.pdf>. Consultada en octubre de 2016.
- [11] M.P. Marder, *Condensed Matter Physics*, Wiley (2000).
- [12] Materials Genome Initiative for Global Competitiveness, National Science and Technology Council, Committee on Technology, <https://www.whitehouse.gov/mgi> and <https://www.mgi.gov>. Consultada en octubre de 2016.
- [13] Nanoinformatics 2020 Roadmap, National Manufacturing Network, http://nanotechninformatics.org/nanoinformatics/index.php/Main_Page. Consultada en octubre de 2016.
- [14] F. Capra and P.L. Luisi, *The systems view of life, a unifying vision*, Cambridge Univ. Press (2014).
- [15] E. Klipp, W. Liebermeister, C. Wierling, A. Kowald, H. Lehrach, and R. Herwig, *Systems Biology*, Wiley – Blackwell (2008).
- [16] A.R. Leach and V.J. Gillet, *An introduction to chemoinformatics*, Kluwer Academic, (2003).
- [17] J. Gasteiger and T. Engel, *Chemoinformatics*, Wiley-VCH (2003).
- [18] K. Roy, S. Kar, R.N. Das, *A primer on QSAR/QSPR modeling, fundamental concepts*, Springer, (2015).

- [19] S. Liu, J. McGree, Z. Ge, and Y. Xie, *Computational and Statistical methods for analyzing big data with applications*, AP Press, (2016).
- [20] P. Flach, *Machine learning, the art and science of algorithms that make sense of data*, Cambridge (2014).
- [21] S.R. Kalidindi, *Hierarchical materials informatics, novel analytics for materials data*, Elsevier, (2015).
- [22] A. Jain, G. Hautier, S. Ong and K. Persson, *Journal of Materials Research*, **31** (8), 977-994 (2016).
- [23] K. Rajan, *Annu. Rev. Mater. Res.* **45**, 153–169, (2015).
- [24] S. Panneerselvam and S. Choi, *Int. J. Mol. Sci.* **15**, 7158–7182, (2014).
- [25] K. Rупing and B.W. Sherman, *NSTI-Nanotech 2004*, Vol 3, 525-527, (2004).
- [26] M.E. Bates, S. Larkin, J.M. Keisler, and I. Linkov, *Beilstein J. of Nanotechnol.* **6**, 1594–1600, (2015).
- [27] L.H. Zou, D. Zhang, *J. Theor. Appl. Infor. Tech.* **44**, 101–105, (2012).
- [28] K. Rajan, *Materials Today*, **October**, 38–45, (2005)
- [29] B.D.A. Levin, E. Padgett, C.C. Chen, et.al., *Sci. Data* **3**:160041 doi: 10.1038/sdata.2016.41 (2016).
- [30] J.M. Rondinelli, N.A. Benedek, D.E. Freedman, A. Kavner, E.E. Rodriguez, E.S. Toberer, and L.W. Martin, *American Ceramic Society Bulletin* **92**, 14–22 (2014).
- [31] O. Isayev, D. Fourches, E.N. Muratov, A. Tropsha, C. Oses, K. Rasch, and S. Curtarolo, arxiv:1412.4096v3 (2014).
- [32] S. Srinivasan and K. Rajan, *Computing in Science & Engineering* Sept/Oct 22–31, (2013).
- [33] N. Sukumar, M. Krein, Q. Luo, and C. Breneman, *J. Matter. Sci.* **47**, 7703 – 7715, (2012).
- [34] Y. Saad, D. Gao, T. Ngo, S. Bobbitt, J.R. Chelikowsky, W. Andreoni, *Data mining for materials: Computational experiments with AB compounds*, Reprint.
- [35] D. De la Iglesia, R.E. Cachau, M. Garcia-Remesal, and V. Maojo, *Computational Science & Discovery* **6**, 1–27, (2013) doi: 10.1088/1749-4699/6/1/014011.
- [36] V. Maojo, M. Fritts, D. De la Iglesia, R.E. Cachau, M. Garcia-Remesal, J.A. Mitchell, C. Kulikowski, *International Journal of Nanomedicine* **7**, 3867–3890, (2012).
- [37] Wolfram Language, <http://www.wolfram.com>. Consultada en octubre de 2016.
- [38] Python Software Foundation, <http://www.python.org>. Consultada en octubre de 2016.
- [39] The R Project for Statistical Computing, <https://www.r-project.org>. Consultada en octubre de 2016.