

Aprendizaje automático aplicado a la caracterización de nanoestructuras base carbono

Luis Enrique Vivanco Benavides

Tecnológico Nacional de México,
Tecnológico de Estudios Superiores de Coacalco

enrique.sic@tesco.edu.mx

Cecilia Mercado Zúñiga

Tecnológico Nacional de México,
Tecnológico de Estudios Superiores de Coacalco

cecilia@tesco.edu.mx

Resumen

Las nanoestructuras base carbono han sido objeto de un creciente interés debido a sus notables propiedades físicas y su potencial para aplicaciones en una amplia gama de campos, desde la Electrónica hasta la Medicina. Sin embargo, comprender y caracterizar completamente estas estructuras a nivel atómico es un desafío complejo debido a su naturaleza intrínsecamente multidimensional y a la enorme cantidad de datos involucrados. En este artículo exploramos cómo el aprendizaje automático, una rama de la inteligencia artificial, ha revolucionado el estudio y la caracterización de las propiedades físicas de nanoestructuras base carbono, permitiendo avances significativos en este campo.

Palabras clave

Informática de materiales, nanotubos de carbono, propiedades estructurales.

Abstract

Carbon-based nanostructures have been the subject of increasing interest due to their remarkable physical properties and their potential for applications in a wide range of fields, from Electronics to medicine. However, fully understanding and characterizing these structures at the atomic level is a complex challenge due to their inherently multidimensional nature and the enormous amount of data involved. In this article we explore how machine learning, a branch of artificial intelligence, has revolutionized the study and characterization of the physical properties of carbon-based nanostructures, allowing significant advances in this field.

Keywords

Materials informatics, carbon nanotubes, structural properties.

Cómo citar este artículo:

Vivanco, L. y Mercado, C. (2023). Aprendizaje automático aplicado a la caracterización de nanoestructuras base carbono. *Azcatl. Revista de divulgación en ciencias, ingeniería e innovación*, 1 (37-41).

Introducción

En los últimos años, el campo de la nanotecnología ha experimentado avances significativos en el modelado de nanomateriales. La mejora en las técnicas de caracterización sigue siendo un hito importante en el estudio y comprensión de diversos nanomateriales, los cuales tienden a poseer propiedades que son difíciles de medir y pronosticar. Una de las estructuras más fascinantes que ha capturado la atención de los investigadores son los nanotubos de carbono (NTC), ya que estas estructuras cilíndricas formadas por átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal poseen propiedades físicas que exhiben un enorme potencial para emplearlas en diversas aplicaciones, abarcando campos como la Electrónica, la Física, la Química y la Biomedicina, por mencionar algunos. Sin embargo, comprender completamente sus propiedades físicas sigue siendo un desafío. Las propiedades complejas de ésta y de otras nanoestructuras base carbono ha motivado la búsqueda de métodos computacionales que agilicen su estudio. En este sentido, el aprendizaje automático (AA) ha demostrado su utilidad en el estudio de los nanomateriales, reduciendo tiempos de diseño y producción (Rajan, 2013), y permitiendo ahondar en la comprensión de sus propiedades físicas (Isayev *et al.*, 2019). El AA ha tenido tal impacto en el campo de la nanotecnología que recientemente ha surgido la informática de materiales (IM), definida como la implementación de la ciencia de datos en problemas inherentes a la ciencia de materiales, ofreciendo una poderosa herramienta para diseñar y descubrir materiales (Rickman *et al.*, 2019). El presente trabajo explora cómo el AA ha innovado en el estudio de los NTC y la caracterización de sus propiedades físicas, permitiendo avances significativos en el campo de la IM.

Metodología

Los artículos presentados en esta revisión de literatura corresponden a publicaciones recientes de revistas registradas en el Journal Citation Report (JCR) sobre campos como nanotecnología, ciencia de materiales, Física y multidisciplinarias; dichas revistas pertenecen a editoriales como Elsevier, Springer e IOP.

Resultados y discusión

El AA es una rama de la inteligencia artificial que realiza el reconocimiento de patrones basándose en estimaciones probabilísticas, lo cual ha atraído la atención de los científicos debido a su capacidad para modelar diferentes sistemas con alta precisión (Ramezanizadeh *et al.*, 2019). Existen dos enfoques principales en las tareas de AA: el aprendizaje supervisado (AS) y el no supervisado (ANS). El AS utiliza datos preetiquetados para aprender la relación entre una salida Y y una entrada X , y está supervisado en el sentido de que debe ser informado de los valores de Y y los valores correspondientes de X (Vasudevan *et al.*, 2021). Asimismo, incluye una amplia variedad de funciones no lineales para extraer conocimiento mediante enfoques de *big data* (Agrawal y Choudhary, 2019). Por otro lado, el ANS aprende las propiedades de los datos sin ninguna guía previa, agrupándolos en conglomerados según sus características (Morgan y Jacobs, 2020), teniendo la ventaja de analizar datos sin necesidad de etiquetarlos, lo que a menudo requiere mucho tiempo y recursos de forma explícita.

Existe una gran cantidad de algoritmos de AA, convirtiéndolo en una herramienta altamente adaptable. Uno de ellos son las redes neuronales artificiales (RNA). Estos métodos son óptimos para el reconocimiento de patrones (Butler *et al.*, 2018), pronóstico de fenómenos físicos

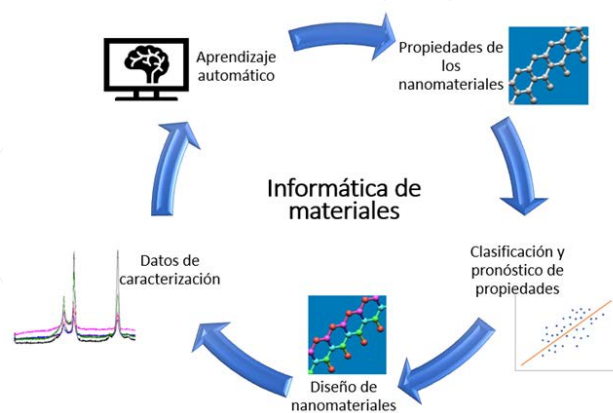


Figura 1. Ciclo de trabajo de la im en el estudio de propiedades de los nanomateriales.

y también para el modelado de nanomateriales (Cheng *et al.*, 2021). Las diferentes variantes de RNA permiten utilizar este enfoque mediante AS y ANS. Métodos como el antes mencionado se han comenzado a utilizar en el campo de la IM con éxito, facilitando el estudio de diversos nanomateriales y obteniendo resultados que con métodos convencionales no sería posible. Un componente crucial en la IM es la obtención y representación de datos experimentales, ya que de ellos dependerá el rendimiento del AA. La Figura 1 representa gráficamente un ciclo de trabajo básico de la IM, donde los datos de caracterización entrenan al AA. Los resultados de estos modelos permiten clasificar y/o pronosticar propiedades de los nanomateriales, con lo cual se optimiza el diseño de éstos.

Aprendizaje automático en el estudio y caracterización de NTC

Se ha comprobado que el AA puede utilizarse en el estudio de propiedades físicas de NTC (Vivanco *et al.*, 2022) (Vivanco-Benavides *et al.*, 2022, en la optimización de la caracterización (Oliynyk y Buriak, 2019) y en el modelado de nanocompuestos reforzados con NTC (Ni *et al.*, 2021). Igualmente es útil en el análisis de la conductividad en NTC para su uso en aplicaciones industriales (Matos *et al.*, 2019). El estudio morfológico de los NTC mediante AA ha permitido pronosticar sus propiedades mecánicas de pared simple (NTCPS) a partir de resultados de simulación de dinámica molecular (Čanađija, 2021).

El AA ha comenzado a ser un auxiliar de gran importancia para identificar los grados de calidad en su morfología. Singh *et al.* (2021). Además, se ha comprobado que el AA puede utilizar los datos resultantes de técnicas como la espectroscopia Raman para extracción de patrones significativos. Por ejemplo, Sheremetyeva *et al.* (2020) estudiaron las propiedades vibratorias del grafito con AA a partir de sus espectros Raman. Asimismo, la importancia de los espectros Raman se hace evidente en el trabajo de Wahab *et al.* (2020), donde se utilizan datos experimentales de dicha técnica y se optimizan con AA para la detección de defectos en el grafito. Por otro lado, Scarisoreanu *et al.* (2019) implementaron AA en es-

pectros Raman para la caracterización automática por lotes de nanopartículas y Kajendarajah *et al.* (2020) lo implementaron para lograr un mapeo espectral Raman optimizado, demostrando que el AA es capaz de mejorar los resultados obtenidos por técnicas de caracterización convencionales. Cabe resaltar que los espectros Raman requieren someterse a un proceso de extracción de parámetros antes de que el AA pueda clasificarlos de manera precisa y confiable.

También se ha utilizado AA para determinar los índices quirales de NTC a partir de imágenes de microscopía electrónica de transmisión (MET) (Förster *et al.*, 2020). Aunque permanece la incógnita de saber si es posible determinar tendencias de homogeneidad en NTC mediante AA a partir de imágenes de met y de microscopía electrónica de barrido (MEB).

El uso de NTC para el desarrollo de materiales y nanocompuestos presenta gran relevancia en un gran número de campos. Bagherzadeh y Shafighfard (2022) utilizaron una combinación de algoritmos de AA para caracterizar materiales compuestos cementosos reforzados con NTC con alto grado de precisión. En contextos similares se ha utilizado AA para predecir la resistencia a la compresión en sistemas de materiales a base de cemento mezclados con NTC, determinando los parámetros óptimos de las propiedades de éstos (Li *et al.*, 2022). Asimismo, se ha logrado predecir la conductividad térmica en nanocompuestos poliméricos reforzados con NTC mediante métodos complejos de AA que al compararse con datos experimentales demuestran un alto grado de efectividad (Liu *et al.*, 2022). Con esto, el AA expone su potencial de convertirse en un método versátil en el diseño de nanocompuestos y materiales reforzados con NTC, analizando no sólo sus propiedades físicas individuales sino también su influencia en materiales compuestos.

Conclusiones

El AA es una herramienta novedosa en el estudio de los NTC, proporcionando nuevas perspectivas para los procesos de caracterización. Gracias a esta tecnología es posible analizar grandes cantidades de datos experimen-

tales y extraer información valiosa que con métodos de caracterización convencionales sería difícil obtener. El AA ha acelerado el avance en el análisis de propiedades físicas de NTC, abriendo nuevas posibilidades de aplicación en el desarrollo de nanosensores en campos como la Electrónica, la Medicina y la energía. Si bien el AA ha demostrado ser una herramienta poderosa, aún existen desafíos por superar. La disponibilidad de datos de alta calidad y la interpretación correcta de los resultados son aspectos críticos que requieren atención continua. Además, es importante mantener un enfoque multidisciplinario, donde expertos en ciencia de datos y en ciencia de materiales trabajen juntos para aprovechar al máximo la inteligencia artificial en el campo de la nanotecnología. El AA tiene el potencial de desempeñar un papel fundamental en la caracterización de nanoestructuras base carbono como los NTC y el grafeno, ayudando a desentrañar sus secretos y acelerar su aplicación en diversas áreas. Se espera que el AA siga impulsando la investigación en este campo, permitiendo avances aún más significativos en el desarrollo y aplicación de nanocompuestos cada vez más eficientes.

Referencias

- Agrawal, A. y Choudhary, A. (2019). Deep materials informatics: Applications of deep learning in materials science. *MRS Communications*, 9(3), 779-792. <https://doi.org/10.1557/mrc.2019.73>
- Bagherzadeh, F. y Shafighfard, T. (2022). Ensemble machine learning approach for evaluating the material characterization of carbon nanotube-reinforced cementitious composites. *Case Studies in Construction Materials*, 17. <https://doi.org/10.1016/j.cscm.2022.e01537>
- Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H., Isayev, O. y Walsh, A. (2018). Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 559(7715), 547-555. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>
- Čanadija, M. (2021). Deep learning framework for carbon nanotubes: Mechanical properties and modeling strategies. *Carbon*, 184, 891-901. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.08.091>
- Cheng, Y., Wang, T. y Gang, Z. (2021). Artificial intelligence for materials science. *Springer Series in Materials Science*, 1. <https://doi.org/https://doi.org/10.1007/978-3-030-68310-8>
- Förster, G. D., Castan, A., Loiseau, A., Nelayah, J., Alloyeau, D., Fossard, F., Bichara, C. y Amara, H. (2020). A deep learning approach for determining the chiral indices of carbon nanotubes from high-resolution transmission electron microscopy images. *Carbon*, 169, 465-474. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.06.086>
- Isayev, O., Tropsha, A. y Curtarolo, S. (Eds.) (2019). *Materials informatics: Methods, tools and applications*. Wiley-VCH. <https://doi.org/10.1002/9783527802265>
- Kajendirajah, U., Olivia Avilés, M. y Lagugné-Labarthet, F. (2020). Deciphering tip-enhanced Raman imaging of carbon nanotubes with deep learning neural networks. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(32), 17857-17866. <https://doi.org/10.1039/DoCP02950E>
- Li, Y., Li, H., Jin, C. y Shen, J. (2022). The study of effect of carbon nanotubes on the compressive strength of cement-based materials based on machine learning. *Construction and Building Materials*, 358. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.129435>
- Liu, B., Vu-Bac, N., Zhuang, X., Fu, X. y Rabczuk, T. (2022). Stochastic full-range multiscale modeling of thermal conductivity of Polymeric carbon nanotubes composites: A machine learning approach. *Composite Structures*, 289. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2022.115393>
- Matos, M. A. S., Pinho, S. T. y Tagarielli, V. L. (2019). Predictions of the electrical conductivity of composites of polymers and carbon nanotubes by an artificial neural network. *Scripta Materialia*, 166, 117-121. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.03.003>
- Morgan, D. y Jacobs, R. (2020). Opportunities and challenges for machine learning in materials science.

- ce. *Annual Review of Materials Research*, 50, 71-103. <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070218-010015>
- Ni, D., Wu, W., Guo, Y., Gong, S. y Wang, Q. (2021). Identifying key parameters for predicting materials with low defect generation efficiency by machine learning. *Computational Materials Science*, 191. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110306>
- Oliynyk, A. O. y Buriak, J. M. (2019). Virtual issue on machine-learning discoveries in materials science. *Chemistry of Materials*, 31(20), 8243-8247. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b03854>
- Rajan, K. (2013). Materials informatics: An introduction. *En Informatics for Materials Science and Engineering: Data-Driven Discovery for Accelerated Experimentation and Application* (pp. 1-16). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-394399-6.00001-1>
- Ramezanizadeh, M., Ahmadi, M. H., Nazari, M. A., Sadeghzadeh, M. y Chen, L. (2019). A review on the utilized machine learning approaches for modeling the dynamic viscosity of nanofluids. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 114. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109345>
- Rickman, J. M., Lookman, T. y Kalinin, S. V. (2019). Materials informatics: From the atomic-level to the continuum. *Acta Materialia*, 168, 473-510. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.01.051>
- Scarisoreanu, M., Ilie, A., Dutu, E., Badoi, A., Dumitriche, F., Tanasa, E., Mihailescu, C. N. y Mihailescu, I. (2019). Direct nanocrystallite size investigation in microstrained mixed phase TiO₂ nanoparticles by PCA of Raman spectra. *Applied Surface Science*, 470, 507-519. <https://doi.org/10.1016/j.ap-susc.2018.11.122>
- Sheremetyeva, N., Lamparski, M., Daniels, C., Van Troeye, B. y Meunier, V. (2020). Machine-learning models for Raman spectra analysis of twisted bilayer graphene. *Carbon*, 169, 455-464. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.06.077>
- Singh, S., Junaid, Z. Bin, Vyas, V., Kalyanwat, T. S. y Rana, S. S. (2021). Identification of vacancy defects in carbon nanotubes using vibration analysis and machine learning. *Carbon Trends*, 5. <https://doi.org/10.1016/j.cartre.2021.100091>
- Vasudevan, R., Pilania, G. y Balachandran, P. V. (2021). Machine learning for materials design and discovery. *Journal of Applied Physics*, 129(7). <https://doi.org/10.1063/5.0043300>
- Vivanco, L. E., Martínez, C. L., Mercado, C. y Torres, C. (2022). Machine learning and materials informatics approaches in the analysis of physical properties of carbon nanotubes: A review. *Computational Materials Science*, 201. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110939>
- Wahab, H., Jain, V., Tyrrell, A. S., Seas, M. A., Kotthoff, L. y Johnson, P. A. (2020). Machine-learning-assisted fabrication: Bayesian optimization of laser-induced graphene patterning using in-situ Raman analysis. *Carbon*, 167, 609-619. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.05.087>



Casa abierta al tiempo
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA



AZCATL
Revista de divulgación en ciencias, ingeniería e innovación