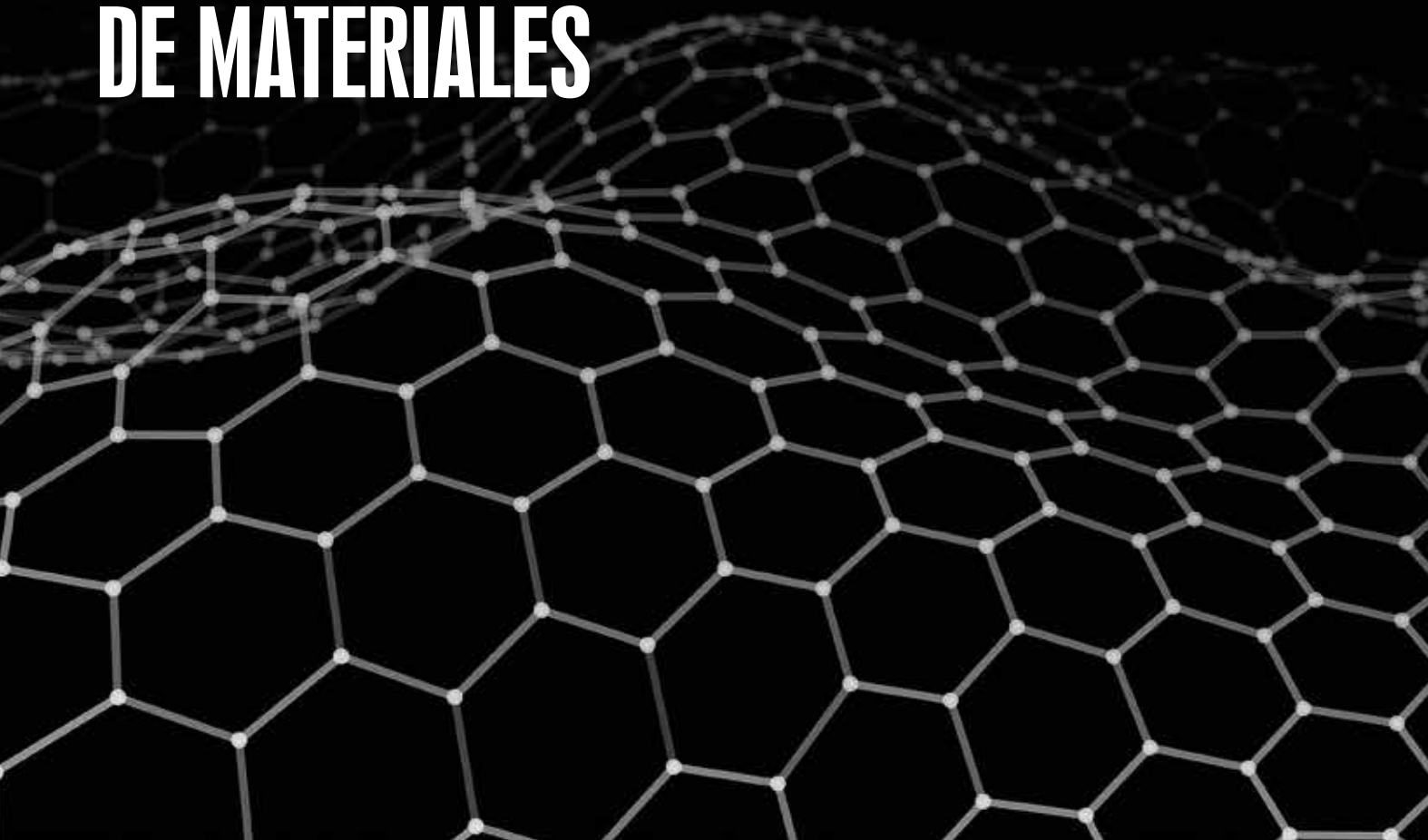


FÍSICA

INTELIGENCIA ARTIFICIAL APLICADA A LA BÚSQUEDA DE MATERIALES



El aprendizaje automático puede acelerar el descubrimiento de cristales bidimensionales similares al grafeno, pero con propiedades específicas

Marcos Pivetta

El grafeno, el primero de los materiales denominados bidimensionales (2D), formados por una sola capa de átomos, obtenido en laboratorio, fue “elaborado” inicialmente de manera trivial en 2004. Los físicos Andre Geim y Konstantin Novoselov, de la Universidad de Manchester, en el Reino Unido, obtuvieron este sólido cristalino utilizando una cinta adhesiva para exfoliar el grafito. Ambos materiales están compuestos solamente de átomos de carbono. Pero la geometría de los átomos de carbono del grafeno es diferente a la que presenta el grafito, y esta peculiaridad es la que le confiere sus propiedades únicas. En el grafeno, los mismos forman una sola lámina de átomos que genera una red con formato hexagonal, similar a un panal de abejas. El grafito está compuesto por varias capas de grafeno, pero separadas unas de otras.

A partir del descubrimiento experimental del grafeno de esa manera casi banal, los métodos de búsqueda de otros materiales 2D con propiedades singulares se han ido sofisticando. Actualmente, una de las formas más prometedoras de buscar materiales de interés formados exclusivamente

por una sola capa de átomos, a menudo compuesta por más de un elemento químico, consiste en recurrir a las técnicas de inteligencia artificial, especialmente a lo que se denomina aprendizaje de máquinas o automático. Por intermedio de esta herramienta computacional, los modelos estadísticos predicen cuáles deberían ser las características más probables de un material 2D, ya fabricado experimentalmente o tan solo previsto teóricamente.

Este abordaje también permite recorrer el camino inverso. “Podemos utilizar las técnicas del aprendizaje automático para buscar en las bases de datos qué materiales bidimensionales ofrecen mayores probabilidades de exhibir una o varias propiedades de interés”, comenta el físico Gustavo Dalpian, de la Universidad Federal del ABC (UFABC), quien estudia el tema en forma conjunta con Adalberto Fazzio, del Centro Nacional de Investigaciones en Energía y Materiales (CNPEM) de Campinas, en el marco de un proyecto financiado por la FAPESP. “Este es un campo de investigación relativamente reciente, al que se ha denominado informática de materiales, que nos permite avanzar hacia el *big data* y manejar grandes volúmenes de información”.

Representación gráfica de la estructura con formato de panal de abejas de los átomos de carbono que componen el grafeno

Dos estudios recientes del grupo de la UFABC ilustran cómo este abordaje puede generar conocimiento sobre los materiales bidimensionales, cuyas dimensiones ínfimas, del orden de los nanómetros, y sus propiedades singulares podrían llevar a una miniaturización aún mayor de los dispositivos ya conocidos y a la creación de otros nuevos. Un artículo publicado en febrero de este año en la revista *ACS Applied Materials & Interfaces* señala que las técnicas de aprendizaje automático son bastante eficaces, con un grado de acierto de alrededor del 90 %, para predecir si un material 2D es magnético o no. En otro trabajo, Dalpian y sus colegas emplean una metodología similar para identificar estructuras formadas por una sola capa de átomos que tienden a presentar una configuración específica de espín (textura de espín), una propiedad cuántica intrínseca de las partículas subatómicas, tal como es el caso de los electrones, asociada al momento angular. Este segundo *paper* salió publicado el 29 de abril en la revista *Scientific Data*.

A los sistemas basados en el aprendizaje automático se les “enseña” a reconocer diferentes patrones asociados a una condición o característica dentro de un gran conjunto de datos. Las muestras que contienen la firma que se busca son separadas y clasificadas de manera distinta a las que no la exhiben. “Se trata de un proceso de descubrimiento del conocimiento”, comenta el físico Osvaldo Novais de Oliveira Júnior, del Instituto de Física de São Carlos en la Universidad de São Paulo (IFSC-USP), quien no participó en los estudios del equipo de Dalpian. “El ser humano realiza inferencias a partir de pequeñas cantidades de datos”.

En el campo de la oncología, por ejemplo, un algoritmo de aprendizaje automático puede programarse para reconocer las características visuales principales que distinguen un cáncer de piel, tales como la forma y tonalidad, de una mancha cutánea benigna. Cuando se exponen al sistema imágenes de lesiones en la piel, este separa las que presentan esas características –que, por lo tanto, es muy probable que correspondan a un tumor– de otras que no se ajustan a ese perfil.

Esta misma lógica puede aplicarse para la prospección de moléculas o compuestos con características específicas. Basta con entrenar al algoritmo de aprendizaje automático para que reconozca algún patrón asociado al magnetismo en los materiales 2D, el tema del primer trabajo del grupo de la UFABC, y el sistema está preparado. El magnetismo es una propiedad clave para la fabricación de dispositivos que almacenan información, como los discos rígidos de una computadora. El empleo de materiales 2D con esta propiedad podría conducir a una reducción aún mayor del tamaño de los dispositivos.

“El problema radica en que no se conoce la firma magnética típica de un cristal bidimensional”, co-

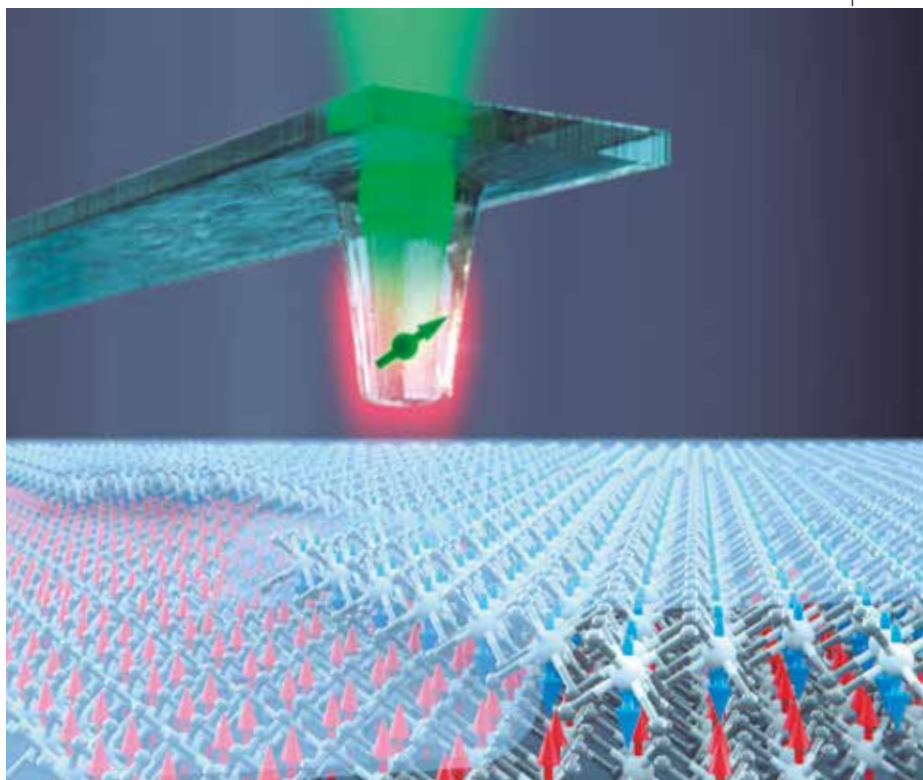
menta el físico Carlos Mera, quien realiza una pasantía posdoctoral en el equipo de Dalpian y es coautor de los dos artículos. “Hace unos cinco años, se pensaba que la geometría interna de los materiales 2D generaba inestabilidades que los hacían incompatibles con el magnetismo”.

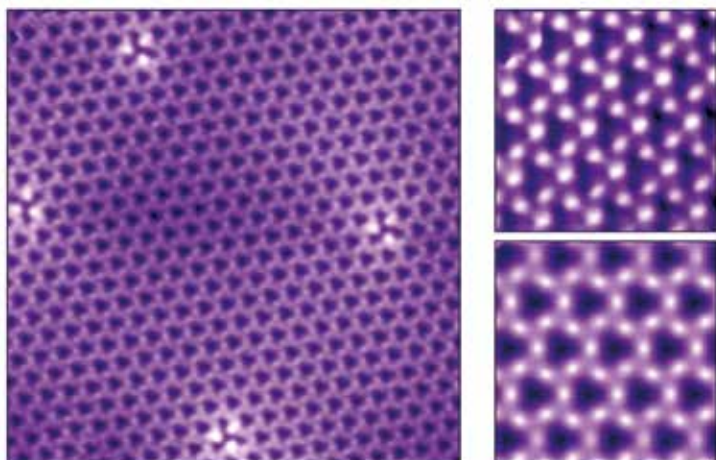
En 2016, un grupo coordinado por investigadores del Instituto de Ciencia Básica de Seúl, en Corea del Sur, midió el antiferromagnetismo, un tipo de magnetismo, en láminas de trisulfuro de níquel-fósforo (NiPS₃), un material 2D. Al año siguiente, un equipo de la Universidad de California en Berkeley (EE. UU.), detectó ferromagnetismo, otra forma de magnetismo, en cristales bidimensionales de hexatelluro de dicromo-digermanio (Cr₂Ge₂T₆). Desde entonces, se ha constatado magnetismo en otros materiales 2D.

En vista de esta tendencia, el equipo de la UFABC se dispuso a analizar una gran base de datos de materiales bidimensionales –Computational 2D Materials Database (C2DB)– administrada por la Universidad Técnica de Dinamarca. Cuando se puso en marcha ese estudio, el repositorio contaba con una serie de informaciones sobre alrededor de 3.400 materiales (en la actualidad, la cifra ya llega a los 4.000). El propósito de la búsqueda era descubrir si era posible que hubiera un conjunto de características que funcionara como un fuerte

LOS MATERIALES BIDIMENSIONALES ESTÁN FORMADOS POR UNA SOLA CAPA DE ÁTOMOS

La ilustración muestra un sensor cuántico empleado para medir las propiedades magnéticas de una capa de un material bidimensional: triyoduro de cromo (CrI₃). En la página de al lado, imagen de la estructura hexagonal del material Cr₂Ge₂Te₆





2

indicador de magnetismo en los cristales formados por una sola capa de átomos. Dicho de otro modo, si entre los materiales 2D existía una configuración típica asociada a esa propiedad, algo similar al patrón de diagnóstico del cáncer de piel basado en la forma y el color de una mancha cutánea.

La estrategia resultó exitosa. A partir del análisis de las características de tres parámetros principales de un material bidimensional, el sistema basado en el aprendizaje automático pudo predecir, con un 85 % de acierto, si un cristal tenía altas probabilidades de ser magnético. Este abordaje se reveló todavía más incisivo, con un 96 % de acierto, para estimar cuándo un material no sería magnético. Esos parámetros son la composición química, la estructura cristalina y la intensidad de lo que se denomina interacción espín-órbita (una propiedad cuántica).

En síntesis, el trabajo indica que los materiales 2D compuestos por átomos de un metal de transición (los elementos químicos de los grupos 3 al 12 de la tabla periódica), con estructuras cristalinas de formato hexagonal (como el grafeno), cuadrado o triangular y con acoplamiento espín-órbita de grado fuerte, tienen altas probabilidades de ser magnéticos. Conforme a lo previsto por el sistema de aprendizaje automático, 478 de los materiales de la base de datos son magnéticos, de los cuales 373 presentan ferromagnetismo y 105 antiferromagnetismo.

En realidad, la información sobre la presencia o ausencia de magnetismo de cada material ya constaba en la base de datos C2DB antes de que los investigadores brasileños iniciaran su trabajo. Este conocimiento es esencial para calcular el grado de acierto en la búsqueda de ese parámetro en los cristales bidimensionales mediante el empleo del aprendizaje automático para validar este

abordaje. “Lo que hicimos fue averiguar si había un pequeño número de propiedades que pudieran hacer las veces de filtros y permitieran predecir, con la ayuda de técnicas de macrodatos, la probabilidad de que un determinado material 2D fuera o no magnético”, explica Dalpian. “Conseguimos cumplir este propósito e incluso determinar si el material es más proclive a presentar ferromagnetismo o antiferromagnetismo”.

De este modo, en la búsqueda de nuevos materiales bidimensionales magnéticos, directamente puede descartarse una serie de cristales que, según este abordaje, tienen mínimas probabilidades de presentar esa propiedad. Los investigadores ahorran así tiempo y esfuerzo con compuestos desconocidos que no suelen poseer magnetismo y pueden concentrarse en otros materiales potencialmente más prometedores.

En el segundo estudio, los investigadores también recurrieron a la base de datos C2DB para localizar materiales que presentan un efecto cuántico asociado a la configuración de los electrones, llamado *spin splitting*. De acuerdo con el estado del espín (o momento angular) de los electrones, apuntando arriba o abajo, los átomos de un material exhiben diferentes configuraciones que, en algunos casos, pueden alterar sus niveles de energía. Existen cuatro variantes conocidas de este efecto: *spin splitting* de tipo Zeeman, Rashba, Dresselhaus y de orden alto.

“Según nuestros cálculos, 436 de los materiales de la base de datos presentarían alguna forma de *spin splitting*. Hemos determinado cuál sería el tipo de efecto más probable que ostenta cada cristal”, dice el ingeniero de materiales Elton Ogoshi, quien cursa su doctorado en la UFABC y es uno de los coautores del trabajo. Teóricamente, el control del espín de los materiales 2D puede llegar a ser la base de la llamada espintrónica, una tecnología de computación emergente basada en la manipulación de esta propiedad cuántica para almacenar y procesar la información.

Además de utilizar algoritmos de aprendizaje automático, este segundo artículo del grupo de investigadores también incluyó el empleo de una técnica estadística conocida como inferencia bayesiana. Este último enfoque, ampliamente utilizado en los programas de inteligencia artificial, permite actualizar la probabilidad de cumplimiento de una hipótesis a medida que se dispone de mayor evidencia o información. “La inferencia bayesiana es una forma de clasificación de datos”, comenta Novais de Oliveira Júnior. A partir de ella, siempre es posible elegir la hipótesis más probable. La estrategia eleva las posibilidades de acierto, aunque no elimine el error. ■

El proyecto y los artículos científicos consultados para la elaboración de este reportaje figuran en una lista en la versión *online* de la revista.