

Simulación de Nanosensores para detectar partículas contaminantes utilizando Sistemas de Información

Luís Eduardo Cano Olivera¹ José Nelson Pérez Castillo²

Resumen

La nanociencia ha despertado el interés de la comunidad científica, empresarial y estudiantil a nivel mundial que dentro de ese marco, y dado los pocos avances que se han realizado en el país, busca experimentar y profundizar en esta temática. Entre las aplicaciones más prometedoras de esta revolución científica y tecnológica están: la energía, la agricultura, el tratamiento de las aguas, el tratamiento de enfermedades, la administración de fármacos, el procesamiento de alimentos, la contaminación, la construcción, la detección y el control de plagas. [3]

Dado el marco de acción que tiene la Nanotecnología, por su magnitud y complejidad, se ha buscado dentro de este enfoque, el de centralizarnos en la Nanosensónica y ver su aplicabilidad en los Sistemas de Información frente a la Microsensónica convencional para tratar dentro de las muchas aplicaciones existentes, el problema de la contaminación ambiental, considerado por muchos como un mal que afecta a la sociedad en general con diferentes enfermedades y síntomas generados por las fuentes externas que las ocasionan.[21]

Palabras clave: Nanosensor, Nanotecnología, Contaminación Ambiental, Web Semántica, Ontología, Sistema de Monitoreo, Taxonomía, Mapas Conceptuales, Fenomenología.

Simulation of Nanosensors for detecting contaminant particulates using the information systems

Abstract

The nanoscience has waked up the interest of the scientific communities, companies and students at world-wide level that within that frame, and it given the few advances that have been made in the country, it's looked for in to experiment and deepen in this topic. Between the most promising applications of this scientific and technological revolution they are: the energy, agriculture, the treatment of waters, the treatment of diseases, the drug administration, the food processing, the contamination, the construction, the detection and the control of plagues.[3]

Given the frame of action that has the Nanotechnology, and by its magnitude and complexity, one has looked for within this approach, centralizing in the Nanosensonic and to see its applicability in the Information Systems as opposed to the Conventional Microsensonic to treat within the many existing applications, the problem of the environmental contamination, considered by many like badly that affects to the society in general with different diseases and symptoms generated by the outsourcing that cause them.[21]

Key words: Nanosensor, Nanotechnology, Environmental Contamination, Ontology, Monitoring System, Taxonomy, Conceptual Maps, Phenomenology.

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años se ha empezado a escuchar sobre la nanotecnociencia (nanotecnologia y nanociencia) [8][11], como una posible solución a problemas que han influido durante décadas y siglos a la humanidad originados incluso desde la gran revolución industrial del siglo XVIII hasta nuestro días; afectando nuestra salud, entorno y hábitat como el llamado Calentamiento Global [20], producido en gran parte por la contaminación que generamos como basuras, desechos tóxicos, humo ocasionado por medios de transporte y fabricas, entre otros. [20]

Artículo recibido en Junio de 2008, aprobado

Doctorando en Informática de la Universidad Pontificia de Salamanca de España. Miembro del Grupo de Investigación GICOGE de la Universidad Distrital

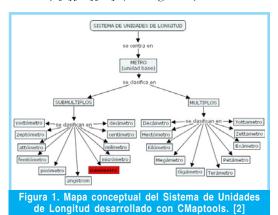
² Dr. en Informática. Docente Universidad Distrital. Director del Grupo de Investigación GICOGE de la Universidad Distrital

Con el uso de la nanotecnología, las tecnologías de la información y las comunicaciones (TICs) y el auge de Internet, se pretende contribuir con un modelo de análisis y seguimiento de partículas contaminantes de una manera eficaz y confiable para poder crear mecanismos que ayuden en la disminución de la contaminación ambiental, teniendo en cuenta que existen sistemas actuales que lo realizan pero orientado a la microsensónica.

NANOTECNOLOGÍA

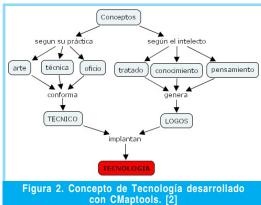
Aunque no existe consenso para una definición de nanotecnología, el término se basa en la combinación de dos palabras: nano y tecnología:

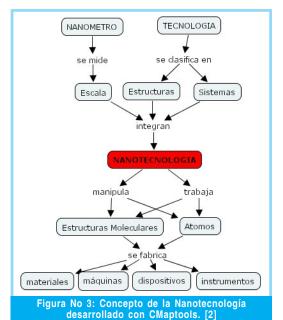
"Nano" es un prefijo griego que significa "mil millones". Es una unidad de medida utilizada que corresponde a una mil millonésima parte **de un metro** (1 nanómetro = 0,000000001 metros.).[9][10][13] (Ver figura 1).



"Tecnología", es una palabra compuesta de origen griego, τεχνολογια, formado por las palabras tekne (τεχνη, "arte, técnica u oficio") y logos (λογοζ, "tratado o conocimiento"), definiéndola como el conjunto de saberes, destrezas y medios necesarios para llegar a un predeterminado fin, de acuerdo a las aplicaciones dadas por las artes y las ciencias.[7][22] (Ver figura 2).

Con base, en estos conceptos, los expertos y científicos en el tema, han definido la Nanotecnología como el desarrollo y la aplicación práctica de estructuras y sistemas en una escala comprendida entre 1 y 100 nanómetros. [8][11][17][18]. (Ver figura 3).





Esta ciencia permite trabajar y manipular las estructuras moleculares y sus átomos. Los conocimientos, conceptos y técnicas derivadas de tal manipulación nos conducen a la posibilidad de fabricar materiales, máquinas, dispositivos e instrumentos nanoestruturados [4][5][6].

En este momento hay un importante número de productos que son o tienen aplicaciones nanotecnológicas. Ejemplo, protectores solares; cosméticos que contienen nanopartículas que facilitan la absorción; raquetas de tenis más ligeras y más resistentes compuestas de nanotubos de carbón; comida con aditivos alimentarios específicos; ropa que no se arruga y repele las manchas o computadoras con nanochips en su interior en donde la lista puede seguir aumentando. [13][16][18].

2.2. Nanosensónica

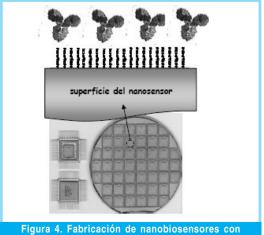
La nanosensónica siempre ha existido, simplemente que antes no se contaba con las herramientas necesarias y suficientes.

Pero, ¿acaso es similar el funcionamiento de un microsensor artificial a un nanosensor artificial?, para dar respuesta, empezaremos diciendo que existen nanosensores naturales que no pueden ser construidos de manera artificial por el hombre, pero si existe la manera de manipularlos y que respondan a un estimulo especifico, así como existen otros que se pueden fabricar de manera artificial parecidos a los microsensores. En esta gama, existen diferentes clasificaciones como las que mencionaremos a continuación:

2.3.1. Nanobiosensor

El nanosensor biológico (nanobiosensor, como se le conoce), es un dispositivo capaz de detectar en tiempo real y con una alta sensibilidad y selectividad, agentes químicos y biológicos. [11][16].

Un *biosensor* es un dispositivo compuesto por dos elementos fundamentales: un receptor biológico (por ejemplo proteínas, ADN, células,....) preparado para detectar específicamente una sustancia y un transductor o sensor, capaz de interpretar la reacción de reconocimiento biológico que produce el receptor y traducirla en una señal cuantificable. En la figura 4 se muestra el esquema básico de la estructura de un biosensor. [10] [16].



tecnología microelectrónica. El biosensor está formado por un transductor similar a los circuitos integrados de silicio y una capa bioreceptora para el análisis específico de la sustancia a determinar. Tomado de CSIC [17]

El término "nanobiosensor" designa a aquellos biosensores cuyas propiedades vienen moduladas por la escala nanotecnológica con la que están fabricados. Se espera que los nanobiosensores tengan una sensibilidad mucho más alta que la de los dispositivos convencionales. Además podrían ser fácilmente introducidos en el interior del cuerpo humano, por lo que podrían proporcionar datos mucho más fiables del estado de salud de un paciente. En este grupo también están, nanobiosensores fotónicos, nanobiosensores basados en nanopartículas de oro o magnéticas, nanobiosensores tipo FET basados en nanotubos de carbono, los biosensores nanomecánicos tipo MEMS/NEMS, que han surgido como reemplazo de los biochips de ADN. [10] [16].

2.3.2. Nanosensor

Consiste en uno o varios microchips que contienen nanofilamentos de aproximadamente una mil millonésima parte de un metro en grosor. Estos nanofilamentos han sido recubiertos de moléculas biológicas con afinidad hacia un compuesto específico (por ejemplo, cierta proteína) asociado con una enfermedad en particular. Cuando una muestra que contiene dicha proteína se acerca a uno de estos sensores ultrasensibles, las moléculas de la proteína se unen a los microfilamentos causando una señal eléctrica detectable. La fuerza de la señal deviene el factor determinante que permite distinguir entre niveles normales y elevados de dicha proteína [11]. La página Web de la empresa Nanosphere ofrece una buena descripción de cómo funcionan estos sistemas [12]. (Ver figura 5).

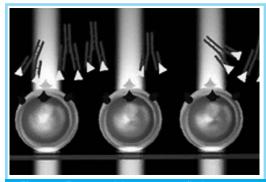


Figura 5. Esquema del nanosensor (la hormona a detectar son los triángulos).(CSIC). Tomado de http://www.elpais.com

3. FENOMENOLOGÍA DE LOS NANOSENSORES

En el mundo de la nanotecnociencia [8], los conceptos pueden significar algo completamente diferente de como lo conocemos dentro el mundo convencional, es por este motivo, que para hablar sobre el enfoque de las tecnologías de la información y las comunicaciones aplicadas a la nanosensónica utilizando herramientas informáticas, se ha optado por llamar "el modelo para construir la fenomenología de los nanosensores aplicado a un desarrollo informático", en razón que los nanosensores se presentan de diferentes formas que podemos o no percibir.

Es de aclarar también, que el objetivo de un sistema informático, es el representar el mundo que nos rodea a través del uso de ordenadores y con el procesamiento de la información que se genera, en donde se pueda dar soluciones de manera fiable y oportuna a unas necesidades específicas [9].

Para el logro de este objetivo empezaremos, definiendo el comportamiento de los diferentes nanosensores, a través de una herramienta informática que facilite el manejo y diseño de ontologías en software. Pero, para poder entender, como esta compuesta, se va a dar una definición al respecto sobre el significado de la "ontología en la informática", porque en otros campos de la sociedad como la filosofía, su significado puede variar.

3.1. Ontología Informática

La semántica de la información, se define a través de *meta datos* (datos que describen otros datos como información, contenido, calidad, condición y otras características de los datos). Estas representaciones se conocen como ontología informática.

Una "ontología informática", entre las muchas definiciones que existen, consiste en una descripción explicita y formal de conceptos en un dominio. La ontología se conforma de: Clases (conceptos), propiedades de estas clases (slots, roles o propiedades) y restricciones sobre esas propiedades. Una ontología informática junto con un conjunto de individuos de clases constituye una base de conocimiento. [9].

3.2. Fenomenología de los Nanosensores aplicada a una Ontología Informática

Para el desarrollo de esta fenomenología, se contempla tres componentes como son: los "nanosensores", los "contaminantes" (o partículas contaminantes) y los "datos", cada uno con una función específica, los cuales fueron modelados con la herramienta protégé [16] (Ver figura 6).

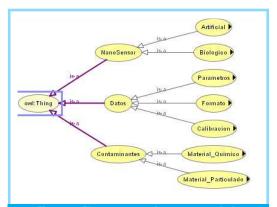


Figura 6. Elementos que forman parte de la fenomenologia de los nanosensores implementados a través de la ontología informática realizada con Protégé (Nanosensor, Datos y Contaminantes) [14].

3.2.1. Nanosensores

Los nanosensores dependen en gran medida de los materiales con los cuales son fabricados o manipulados para que respondan a un estimulo especifico, adquiriendo de ahí su respectivo nombre, además que dependen de una infraestructura tecnológica para su respectiva fabricación. Muchos de estos nanosensores, han sido desarrollados con carbono, dadas las propiedades que ofrecen como son: la dureza, resistencia, propiedades mecánicas y estabilidad química entre otras.

Pero otro aspecto a resaltar, es que su funcionamiento y operabilidad son bastantes similares a la microsensónica comportándose casi igual, como por ejemplo los nanosensores artificiales que tienen actuador o transductor, pero con la única diferencia de que tienen uno o mas componentes fabricados a escala nano, además que la señal que emiten no es tan grande como la de los microsensores. En la nanobiosensónica, las clasificaciones varían, según la forma de manipulación que se realice, y el estimulo que se quiera que responda.

3.2.2. Contaminantes (o Partículas Contaminantes)

El siguiente paso a seguir, es que los nanosensores pueden ser fabricados y/o manipulados para que respondan a diferentes estímulos. Es de aclarar que aunque la teoría dice que se puede desarrollar nanopartículas para que las partículas contaminantes se adhieran a estas, y luego destruirlas; nuestro caso no va hasta ese punto. Nuestro caso va a la forma en que puedan responder esas partículas contaminantes a los nanosensores.

Entre las "partículas contaminantes" que afectan el medio ambiente, están el material particulado (sólidos como ceniza, hollín, materia orgánica, polvo y la sal y los líquidos como el Aerosol y la niebla), el material químico (gases de tipo primario como el Clorofluocarbono, Metano, Dióxido de Carbono, Monóxido de Carbono, Nitrógeno, Oxido Nitroso, Oxido de Nitrógeno y el Oxido de Azufre y gases de tipo secundario como el Aldehído, Ozono y el Nitrato Peroxiacetilico) y el vapor (conformado por el agua y el compuesto orgánico volátil).

3.2.3. Datos

Una vez se realiza las respectivas definiciones tanto con los nanosensores como con las partículas contaminantes, el paso a seguir consiste en modelar la información que se va a obtener de los nanosensores a partir del estimulo para el cual fueron desarrollados.

Para garantizar que la información adquirida por el nanosensor sea confiable, se debe tener en cuenta: 1) la calibración, encargada de analizar la curva generada por los coeficientes polinomiales, el inicio y número de segmentos. 2) La respuesta de la frecuencia, se mira el punto de amplitud y de frecuencia. 3) El Formato de los Datos como son la Medida (Tipo de medida), el Prototipo (Número de Bits, Tolerancia y Valor de Inicio) y la Unidad Física. 4) Forma de fabricación como: tipo eléctrico (Contempla corriente, salida eléctrica máxima y mínima, sensibilidad y el tiempo de respuesta); tipo físico (salida física máxima y mínima), tipo mecánico (dureza, flexibilidad, pesaje, resistencia, salida mecánica máxima y mínima), tipo mineral (conductividad, dureza mineral, estabilidad mineral, resistencia mineral máxima y mínima, salida mineral máxima y mínima, la superficie mineral y la sustancia), tipo químico (Área

expuesta, salida química máxima y mínima, tasa de emisión, tiempo máximo y mínimo y el tipo de químico), tipo térmico (Conductividad térmica máxima y mínima, temperatura). 5) Ubicación del nanosensor que puede ser fija, móvil o areal (continental, global, rural, urbana). 6) Localización (Latitud y Longitud).

4. SIMULANDO LOS NANOSENSO-RES, EN VEZ DE FABRICARLOS

Desde este punto de vista, lo único que se ha realizado es el modelamiento funcionamiento de los nanosensores para que responda a unos estímulos específicos, de acuerdo a unos parámetros claros definidos.

Pero viene una pregunta, ¿Cómo saber si esto funciona, cuando no se puede fabricar un nanosensor? Si bien es cierto, en el país no se cuenta con una infraestructura tecnológica avanzada para facilitar la construcción de nanosensores, ni tampoco se consiguen los componentes necesarios en el mercado colombiano para fabricarlos debiendo mandarlos a fabricar fuera del país; y sin olvidar tampoco que los costos de fabricación de los nanosensores pueden oscilar alrededor de 1'000.000 euros (aproximadamente \$3.032'520.000 pesos colombianos) si se elaboraran aquí; entonces surge una pregunta, ¿Cómo poder analizar y fabricar un nanosensor sino se cuenta con la tecnología y presupuesto suficiente?

La respuesta es sencilla, se debe recurrir a sistemas de información que permitan simular tanto su fabricación y funcionamiento para poder obtener respuestas a los estímulos suministrados.

Existen muchas herramientas que permiten la simulación de nano estructuras tanto de licenciamiento privativo como licenciamiento libre entre las que están NextNano, Nanoforce, NanoHive, Nanoxplorer, Nanotube Modeler de Jcrystal, TinyOsnano y Virtual NanoLab de Atomistix, por mencionar algunas, y aunque casi todos se encargar de visualizar y diseñar dispositivos, nos inclinamos por esta ultima de la casa Atomistix por ser una de las mas completas en cuanto al diseño y simulación de nano estructuras y por su amigable interfaz gráfica.

Atomistix, permite conocer las características técnicas de los átomos que se quieren analizar, así como entender el comportamiento de reacción entre los diferentes elementos o estímulos que se utilicen. Por medio de esta herramienta se pudo realizar el diseñó un pequeño nanosensor con nanotubos de carbón para detectar monóxido de carbono CO. (Ver figura 7).

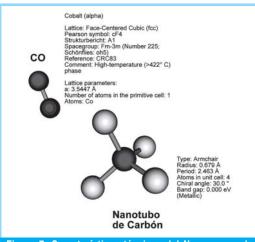


Figura 7. Características técnicas del Nanosensor de Nanotubo de Carbón para detectar Monóxido de Carbón, elaborado con Atomistix.

Conociendo las bases de un nanosensor, se pudo desarrollar un dispositivo electrónico que funcione simulando el comportamiento de un nanosensor, con la diferencia, claro esta, de que los elementos con los que se fabrico no tienen estructuras nano sino micro; resultando un PLC (Controlador Lógico Programable), conformado por la entrada de las señales, la unidad central (procesador y memoria de programas) y la salida de las señales. (Ver figura 8).



Figura 8. Construcción del PLC (Controlador Lógico Programable) simulando el funcionamiento de un nanosensor.

5. INTEGRÁNDOLO CON UN SISTEMA DE INFORMACIÓN SEMÁNTICO

Una vez se obtiene el dispositivo electrónico, y terminada la ontología informática, el paso a seguir, consiste en integrarlos, en donde se utilizan todas las propiedades derivadas de la ontología informática, las reglas que se incluyen desarrolladas con el razonador Racer, además de otras herramientas como son: Jess, Jena y SParq formando parte de lo que se conoce como la Web Semántica, cada uno con un propósito diferente. Con "jess" se crean las reglas de los diferentes ítems de la ontología de software, con "sparq" se crean las diferentes consultas, y "jena" se utiliza para el almacenamiento de RDF [14]. (Ver figura 9).

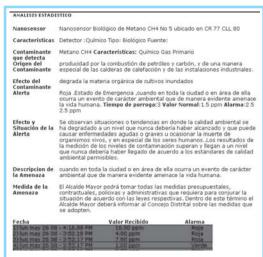


Figura 9. Resultados arrojados de acuerdo a la simulación del prototipo del nanosensor a través del sistema de información

El RDF, consiste en un archivo XML, que puede ser leído por cualquier sistema informático, e integrarse con cualquier otro tipo de ontología relacionada con sensores [1], y en su visualización Web, se desarrolla un Web Site para que se pueda visualizar los resultados generados y las diferentes alertas de acuerdo a las especificaciones de riesgo contempladas para cada tipo de partícula contaminante.

Con base en este prototipo de simulación de nanosensores para detectar partículas contaminantes, se logro unos resultados fiables, y que de poder integrarlos con nanosensores reales, su funcionamiento debe ser igual.

6. CONCLUSIONES

Pese de que en Colombia, no se cuente con la infraestructura tecnológica necesaria para construir nanosensores, se debe aprovechar las ventajas que nos ofrecen las herramientas informáticas de simulación, y con la tecnología que nos rodea podemos simular su funcionamiento, en donde cabe resaltar, que cuando se cuente con un dispositivo nanosensónico en Colombia, y lo pongamos a prueba, su operabilidad va a ser casi idéntica al prototipo de simulación.

Utilizando la ontología informática de los nanosensores, esta se puede comunicar con otras tecnologías de la Web Semántica, siendo una ventaja, obteniendo así sistemas más complejos y robustos en un futuro.

En Colombia, tiene futuro la nanotecnociencia, porque se pueden desarrollar muchas cosas en varios campos de la sociedad como la salud, pero en cuanto a la nanosensónica, aun estamos bastante lejos de que el país empiece a fabricarlos, por sus elevados costos.

Referencias Bibliográficas

- Abdulmotaleb El Saddik, Mohamad Eid, Ramiro Liscano. "A Novel Ontology for Sensor Networks Data".
- [2] CMAP TOOLS Knowledge modeling kit http://cmap.ihmc.us
- [3] COMISIÓN EUROPEA. (2004) Towards a European Strategy for Nanotechnology. Comunicación de la Comisión 338. (Versión electrónica descargable desde www.cordis.lu/nanotechnology)
- [4] CRECES. Progresos en la fabricación de nanotubos http:// www.creces.cl/new/index.asp?imat=%20%20%3E%20%2028 &tc=3&nc=5&art=1010
- [5] DACCACH T., José Camilo Artículos Delta Nuevas Tecnologías http://www.deltaasesores.com/prof/PRO285.html
- [6] EL UNIVERSAL DE MEXICO. Crean nanoalambres que producen electricidad. http://www.eluniversal.com.mx/articulos/30506.html
- [7] ESPASA-CALPE (2005). Diccionario de la lengua española, Madrid.
- [8] GIRALDO, Jairo. GONZALEZ, Edgar, GOMEZ BAQUERO, Fernando. NANOTECNOCIENCIA: Nociones preliminares sobre el universo nanoscópico. Asociación Colombiana Buinaima, Nanocolomgia, IEEE CNNN y Nanocitec. 2007
- [9] HAPPEL, H. J. y Seedof, S., 2006. Applications of ontologies in software engineering. En: 2 nd . International workshop on semantic web enabled software engineering. SWESE. Athens, GA. U.S.A.
- [10] LECHUGA, Laura M. Nanobiotecnología: Avances Diagnósticos y Terapéuticos. Grupo de Biosensores. Instituto de

- Microelectrónica de Madrid (IMM-CNM). CSIC laura@imm.cnm.csic.es http://www.madrimasd.org/revista/revista35/tribuna/tribuna2.asp
- [11] NALWA, Hari Singh. Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology. Editor: (Editor-in-Chief Journal of Nanoscience and Nanotechnology) Editorial: AMERICAN SCIENTIFIC PUBLISHERS.
- [12] NANOSPHERE (http://www.nanosphere-inc.com).
- [13] NANOTECHNOLOGY JOURNAL. Journal de Nanotecnología. www.iop.org/EJ/journal/0957-4484
- [14] PROTÉGÉ http://protege.stanford.edu
- [15] ROGERS, Professor. Science Videos. Vanderbilt University, http://www.vanderbilt.edu/news/science_video
- [16] SÁNCHEZ, J.; GUERRERO, H.; MARTÍN, S.; TAMAYO, R.; COSME, M. L.; MAZADIEGO, R.; SERRANO, P. (2005) Nanotecnología en España. Sistema Madrid (Libro 20). Dirección General de Universidades e Investigación, Consejería de Educación de la Comunidad de Madrid. (Versión electrónica descargable desde: www.madrimasd.org/informacionidi/biblioteca/Publicacion/default.asp).
- [17] SERENA DOMINGO, Pedro Amalio. Nanociencia y nanotecnología: aspectos generales. Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. Consejo Superior de Investigaciones Científicas U.A.M. http://www.unizar.es/departamentos/ fisica_mat_condensada/people/deteresa/presentations/ aplicaciones%20de%20la%20nanotecnologia2006.pdf
- [18] SMALLTIMES. Revista Gratuita de Nanotecnologia. http:// www.smalltimes.com/
- [19] TERESA, José Maria de. Nanotecnologia 2006. Universidad de Zaragoza.http://www.unizar.es/departamentos/ fisica_mat_condensada/people/deteresa/presentations/ aplicaciones%20de%20la%20nanotecnologia2006.pdf
- [20] WEART, SPENCER EL CALENTAMIENTO GLOBAL. Año de edición:2006. Plaza edición: PAMPLONA
- [21] WMA. Asociación Médica Mundial WMA Declaración de Sao Paulo de la Asociación Médica Mundial sobre la Contaminación. http://www.wma.net/s/policy/p22.htm
- [22] WORDREFERENCE. http://www.wordreference.com.

Luís Eduardo Cano Olivera

Ingeniero de Sistemas, Universidad Autonoma de Colombia. Especialista en Diseño y Construcción de Soluciones Telemáticas, Universidad Autónoma de Colombia, Bogota, Colombia. Candidato a Magíster en Ciencias de la Información y las Comunicaciones con énfasis en Sistemas de Información, de la Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Doctorando en Informática de la Universidad Pontificia de Salamanca de España. Docente Universitario, Miembro del Grupo de Investigación GICOGE de la Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Iecanoo@udistrital.edu.co.

José Nelson Pérez Castillo

Profesor Titular, Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Fundador y director del Grupo Internacional de Investigación en Informática, Comunicaciones y Gestión del Conocimiento (GICOGE). Doctor en Informática, Universidad de Oviedo. Magíster en Teleinformática, Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Especialista en Sistemas de Información Geográfica, Cartografía Automática y Teledetección, Universidad de Alcalá de Henares. Ingeniero de Sistemas Universidad Distrital Francisco José de Caldas. nelsonp@udistrital.edu.co