



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
COLEGIO DE INGENIERÍA QUÍMICA



Tesis:

“Uso de machine learning para predecir propiedades de nanopartículas de metales nobles”

Para obtener el título de:

Licenciatura en Ingeniería Química.

Presenta:

Orli Vega Villegas

Director de Tesis:

Dr. Jesús Andrés Arzola Flores

Co-Asesor de Tesis:

Dra. Juana Deisy Santamaría Juárez

Febrero 2026

ÍNDICE

Resumen.....	5
Planteamiento del problema	6
Justificación.....	8
Objetivo general	10
Objetivos específicos.....	10
Hipótesis.....	11
Introducción	12
CAPÍTULO I.....	14
Marco teórico.....	14
1.1 Definición y clasificación de las nanopartículas	15
• Nanopartículas semiconductoras:.....	15
• Nanopartículas poliméricas:.....	15
• Nanopartículas basadas en carbón.....	16
• Nanopartículas metálicas:	16
• Nanofibras de carbono:	16
• Nanopartículas de una dimensión:	16
• Nanopartículas de dos dimensiones:	17
1.2 Metales nobles y sus principales características (Au, Ag, Pt, Pd).....	17
1.4 Definición e importancia del machine learning	19
1.5 Tipos de aprendizaje automático	20
1.5.1 Aprendizaje supervisado	20
1.5.2 Aprendizaje no supervisado	21
1.5.3 Aprendizaje por refuerzo.....	21
1.6 Algoritmos de machine learning más utilizados	21
1.6.1 Regresión lineal y no lineal.....	21
1.6.3 Máquinas de soporte vectorial (SVM)	23
1.6.4 Redes neuronales artificiales	23
1.7 Software MiePlot	23
CAPÍTULO II.....	24
Metodología	24
2.1 Determinación de las eficiencias ópticas de nanopartículas esféricas de plata, oro y cobre	24

2.2 Implementación de algoritmos de aprendizaje de máquina	24
2.3 Descripción del Conjunto de Datos y Preprocesamiento.	24
2.4 Protocolo de Partición y Validación (k-Fold Cross-Validation)	26
2.5 Métricas de Desempeño	26
CAPÍTULO III.....	28
Resultados y Discusión.....	28
3.1 Evaluación Global de los Modelos de Regresión.....	28
3.2. Discusión por Material	28
3.2.1 Nanopartículas de Plata (Ag)	28
3.2.2 Nanopartículas de Oro (Au)	30
3.2.3 Nanopartículas de Cobre (Cu).....	31
3.2 Importancia de la Intensidad del Modo Dipolar.....	32
3.3. Aplicaciones en Ingeniería y Nanotecnología.....	34
CONCLUSIONES	35
REFERENCIAS	36



BUAP

Oficio No. FIQ/DI/828/2025

Asunto: Modalidad de Titulación por Examen Profesional por Tesis

Mtro. Juan Manuel Rosas Tapia
Director de Administración Escolar de la BUAP
Presente:

At'n: Psic. Marcela Juárez Zenteno
Jefa del Departamento de Titulación

Por este medio, me permito hacer de su conocimiento que el alumno:

Nombre completo del alumno:
Matrícula:
Sustentante de la Carrera en:
Fecha de Examen Profesional:
JURADO:

Orli Vega Villegas
201807127
Ingeniería Química
Viernes 30 de enero 2026 11:00 horas Presencial.

NOMBRE	CARGO
Dr. Miguel Ángel García Castro	Presidente
Dr. Guillermo Santamaría Juárez	Secretario
Dr. Jesús Andrés Arzola Flores	Vocal

NOTA: ESTE DOCUMENTO TIENE VIGENCIA POR 6 MESES A PARTIR DE LA FECHA DE SU EXPEDICIÓN.

Sin otro particular, le reitero las seguridades de mi atenta y distinguida consideración.

Atentamente

"Pensar Bien, Para Vivir Mejor"

H. Puebla de Z., a 18 de Diciembre de 2025

S. Vázquez
M.I.C. Ma. Gpe. Tita Vázquez Espinosa de los Monteros
Directora



C.c.p. Archivo.

Facultad
de Ingeniería
Química

Av. San Claudio s/n, Col. San
Manuel, Ciudad Universitaria,
Puebla, Pue. C. P. 72590
(222) 229 55 00
Exts. 7250 y 7251

Agradecimientos

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), a la Facultad de Ingeniería Química y al Colegio de Ingeniería Química por brindarme, por la formación académica brindada y por proporcionar los recursos necesarios para el desarrollo de este trabajo.

A mis directores de tesis, por su orientación, dedicación y valiosas observaciones durante la realización del presente trabajo, las cuales fueron fundamentales para su conclusión.

A los revisores, por el tiempo dedicado a la revisión de esta tesis y por sus comentarios y sugerencias, que contribuyeron a mejorar la calidad del trabajo.

A mi familia, por su apoyo incondicional, paciencia y motivación constante a lo largo de mi formación académica.

Finalmente, a todas aquellas personas que de manera directa o indirecta contribuyeron a la realización de este trabajo.

Resumen

En este trabajo se establece un modelo predictivo que emplea el radio de nanopartículas (NPs) esféricas de oro (Au), plata (Ag) y cobre (Cu) como variable independiente y la intensidad del modo dipolar de dichas NPs como variable a predecir, para esto se utilizó el software MiePlot para calcular los espectros teóricos de absorción, esparcimiento (dispersión) y extinción mediante la Teoría de Mie, con el propósito de identificar el máximo dipolar en función del radio de las NPs.

Los resultados obtenidos se utilizaron para el entrenamiento, prueba y validación de modelos de aprendizaje supervisado. La regresión por vectores de soporte con kernel de función de base radial (SVR: *Support Vector Regression* (RBF: *Radial Basis Function*)) y k vecinos más cercanos (KNN: *K-Nearest Neighbors*) lograron un desempeño superior con respecto a la regresión lineal, alcanzando coeficientes de determinación superiores a 0.90 y errores absolutos medios bajos. El modelo SVR presentó mejores resultados específicamente para las NPs de Au, mientras que KNN tuvo mejores resultados para Ag y Cu.

Con los resultados obtenidos se demuestra que el uso del (ML: *Machine Learning*) permite hacer predicciones de la intensidad del modo dipolar con un nivel de confiabilidad alto, siendo así una herramienta complementaria a la Teoría de Mie para el diseño y optimización de NPs plasmónicas en diferentes aplicaciones.

Planteamiento del problema

En los últimos años, la inteligencia artificial, específicamente aprendizaje de máquina (ML: *Machine Learning*) ha adquirido mayor relevancia debido a su uso en diversos sectores para analizar datos y predecir sucesos a partir de patrones y tendencias haciendo uso de algoritmos. Algunos de los métodos de ML, probablemente los más relevantes son el aprendizaje supervisado (SL: *Supervised Learning*) y el aprendizaje no supervisado (USL: *Unsupervised Learning*). La diferencia que existe entre estos métodos es la forma en que estos utilizan los datos para aprender. Por un lado, los algoritmos de SL requieren que cada conjunto de datos de entrada este acompañado por su etiqueta para después detectar patrones y eventualmente hacer predicciones sobre la variable de interés. Por el contrario, los algoritmos de USL no requieren que el conjunto de datos de entrada tenga una etiqueta o variable de interés especificada, sino que estos algoritmos detectan patrones y agrupan los datos basándose en características comunes [1].

Se han utilizado diferentes herramientas teórico-numéricas para determinar las propiedades ópticas de las nanopartículas (NPs). Algunos de los métodos más utilizados son los basados en ecuaciones integrales, métodos de diferencias finitas y métodos discretos, como la Aproximación de Dipolo Discreto (DDA: *Discrete Dipole Approximation*). Por ejemplo, DDA ha sido ampliamente utilizado para determinar las eficiencias de extinción, absorción y dispersión de NPs metálicas. Sin embargo, para ello, se debe proporcionar la morfología de la NP y otros parámetros como el índice de refracción del medio en el que se encuentra, así como el material y el tamaño, lo cual involucra el uso de diversas técnicas de caracterización, otro método que ha sido utilizado es el basado en las ecuaciones de Maxwell y en su solución exacta, esta es la teoría de Mie que explica la absorción, dispersión y extinción cuando una onda electromagnética incide sobre una estructura esférica. La teoría de Mie es altamente utilizada en nanopartículas metálicas (Au, Ag, Cu, etc.) y así explicar sus propiedades ópticas. En las NPs de metales nobles es usada para explicar la resonancia de plasmones superficiales localizados (LSPR: *localized surface plasmon resonance*), para simular espectros UV-Vis y estudiar efectos de tamaño y el medio en el que se encuentra.

Por lo anterior en este trabajo proponemos hacer uso de la teoría de Mie mediante el software MiePlot para determinar la intensidad del modo dipolar de NPs esféricas de Ag, Au y Cu para diferentes radios dispersas en un medio con índice de refracción 1.33. Asimismo, utilizar los datos obtenidos para el entrenamiento, prueba y validación de modelos de aprendizaje supervisado para predecir la intensidad del modo dipolar de estas NPs esféricas. Esto generará una nueva herramienta para caracterizar NPs, de bajo costo y accesible [1].

Justificación

Los métodos computacionales surgen como herramienta para el estudio de sistemas complejos debido a su capacidad de simular, analizar y predecir propiedades, estos han sido de ayuda a la investigación experimental, proporcionando información que puede ser complicada o imposible de obtener mediante técnicas experimentales. La Teoría de Mie y su implementación en MiePlot es una herramienta que puede ser utilizada para estudiar las

eficiencias ópticas de NPs, debido a que permite estudiar la respuesta óptica de NPs esféricas con diferentes radios y dispersas en diferentes medios.

Por otro lado, ML permite predecir patrones y tendencias a partir de un conjunto de datos, mediante dos principales métodos, SL, el cual consiste en modelos a los que se le debe proporcionar ejemplos para que puedan predecir la salida de la o las variables de interés correctamente. Por otra parte, el USL, no requiere datos etiquetados y se utiliza para realizar principalmente agrupación o reducción de dimensiones [2].

En este proyecto de tesis proponemos hacer uso de MiePlot en conjunto con herramientas de ML para predecir la intensidad de modo dipolar NPs esféricas de Au, Ag y Cu, esto ofrece una alternativa de menor costo a las técnicas de caracterización ya existentes.

Objetivo general

Predecir la intensidad del modo dipolar de nanopartículas esféricas de plata, oro y cobre a partir de sus características morfológicas.

10

Objetivos específicos

- Calcular los espectros de extinción, absorción y dispersión teóricos de nanopartículas esféricas de oro, plata y cobre de diferente radio, empleando la teoría de Mie y su implementación en MiePlot.
- Emplear aprendizaje supervisado para predecir la intensidad del modo dipolar de nanopartículas esféricas de oro, plata y cobre, utilizando como variable predictora el radio de las nanopartículas.

Hipótesis

Predecir la intensidad del modo dipolar de nanopartículas esféricas de plata, oro y cobre a partir de su radio, considerando que este parámetro geométrico determina de manera significativa la interacción de la nanopartícula con la radiación electromagnética y, en consecuencia, la respuesta plasmónica descrita por la Teoría de Mie. Asimismo, se propone que dicha relación puede ser capturada mediante modelos computacionales.

Introducción

En los últimos años las nanopartículas metálicas y su estudio ha sido de gran interés debido a las propiedades ópticas, electrónicas y catalíticas que poseen, las cuales son específicas de las partículas en escala nanométrica. Según la Organización Internacional de Normalización (ISO: *International Organization for Standardization*) las nanopartículas tienen tres dimensiones externas dentro de la nanoescala (1-100nm), lo que permite una alta relación superficie-volumen y junto con los efectos cuánticos consiguen poseer propiedades dependientes del tamaño, la forma y el entorno dieléctrico [3].

12

Una de las características de las nanopartículas esféricas de metales nobles como la plata, oro y cobre es su capacidad de interactuar intensamente con la radiación electromagnética en el rango visible y cercano al infrarrojo, dando lugar a un fenómeno denominado resonancia de plasmón superficial (RPS) que corresponde a la oscilación de los electrones en conjunto cuando son excitados por una onda electromagnética incidente. La RPS ha sido estudiada por la importancia que tienen en la determinación de propiedades ópticas fundamentales como la posición del máximo de absorción, el ancho de banda y la intensidad del pico plasmónico, estas características han permitido su aplicación en áreas como en el diagnóstico médico, terapias fototérmicas haciendo uso principalmente de AuNPs, catálisis heterogénea, aprovechamiento de la energía solar y espectroscopía mejorada.

La RPS se puede ver afectada comúnmente por el tamaño de las NPs, la geometría, la constante dieléctrica del metal, el índice de refracción del medio o la interacción entre las partículas, siendo así que en las NPs esféricas el aumento de radio genera un corrimiento del pico plasmónico hacia una longitud de onda de mayor longitud, lo que se conoce como corrimiento al rojo, además de sufrir cambios en la intensidad y el ancho del pico.

Comúnmente para obtener la RPS se hace uso de la espectroscopía UV-Visible, la cual es una técnica que permite medir la absorbancia o extinción en función de la longitud de onda, en este caso la frecuencia de resonancia plasmónica es el máximo de absorbancia que se

obtenga. Existen además otras técnicas complementarias como la microscopía electrónica que permite conocer el tamaño o morfología de las nanopartículas.

En la teoría, el comportamiento de las nanopartículas esféricas puede ser descrito haciendo uso de la teoría de Mie, la cual hace uso de las ecuaciones de Maxwell y que fue desarrollada por Gustav Mie en 1908 [4], proporciona una solución exacta a estas ecuaciones para la absorción y dispersión de luz para partículas esféricas, con la que es posible calcular eficiencias de absorción, dispersión y extinción para predecir la posición e intensidad del modo dipolar en función del tamaño y las propiedades del material. Esta solución se vuelve más larga y compleja cuando se resuelve teóricamente, por lo que las herramientas que la inteligencia artificial ofrece, específicamente el ML representan una alternativa útil y rápida para la predicción de la intensidad o posición de la RPS en función de variables conocidas como el radio, el material y el índice de refracción, lo que permitiría reducir tiempos de simulación y optimizar el diseño experimental de materiales.

Estas pruebas permiten la contribución de herramientas computacionales de la actualidad para la predicción y optimización de las propiedades ópticas de nanopartículas de metales nobles.

CAPÍTULO I

Marco teórico

14

Existen diversas técnicas para caracterizar las propiedades fisicoquímicas, ópticas y morfológicas de las NPs, cada una de las técnicas tienen ventajas y desventajas dependiendo de la información y el material al que se van a aplicar, entre las técnicas más utilizadas están, la microscopia electrónica de barrido (SEM: *Scanning Electron Microscopy*) [5], la espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR: *Fourier Transform Infrared Spectroscopy*) [6] y la espectroscopia ultravioleta-visible (UV-Vis) [7], [8], siendo esta última la más utilizada en laboratorios debido a su disponibilidad, simplicidad y bajo costo en comparación con las otras técnicas. Debido a lo anterior, se puede utilizar UV-Vis para obtener más información sobre el material que se estudia, ya que, un espectro de absorbancia, además de brindar información de las eficiencias ópticas, también puede proporcionar información sobre el tamaño y morfología que tienen las NPs de la solución [9], [10], [11], ya que la absorbancia está relacionada con dichas propiedades.

Las nanopartículas de plata (AgNPs) han atraído una atención significativa en la investigación científica y tecnológica debido a sus propiedades, las cuales tienen diversas aplicaciones en campos como la medicina por sus propiedades bactericidas [[12], como nuevas herramientas para el tratamiento de cáncer [13], en fotocatálisis para la eliminación de colorantes provenientes de la industria [14], entre muchas otras. Gracias a los avances en nanociencia y nanotecnología es posible obtener diferentes tipos de morfologías y tamaños debido a las diversas técnicas de síntesis físicas y químicas que existen, entre las morfologías más estudiadas se encuentran de tipo, esféricas [15], estrella [16], hilos, triángulos planos [17], cúbicas perfectas, cóncavas y porosas [18], [19].

Por otro lado, las nanopartículas basadas en Au han mostrado ser de gran utilidad en varios ámbitos, como lo son la biomedicina que por sus diferentes geometrías como nanoesferas, nanorodillos y nanoestrellas, favorecen a su uso en radioterapias para el cáncer y también en

la misma área para la prevención del cáncer y como transporte para varios fármacos y en el cómo administran los mismos fármacos que transportan, además de ser una de sus características más importantes la LSPR, la cual depende de la forma y tamaño de la partícula siendo modificable dependiendo de su aplicación [20].

Así mismo, el Cu posee propiedades que lo convierten en un material muy útil en forma de NPs, como lo son su alta conductividad eléctrica, sus propiedades antimicrobianas y su actividad catalítica, es por eso que se les da un uso concreto en industrias y áreas, como lo son la medicina, la electrónica y los sistemas de remediación ambiental. Aunque sus propiedades y características en gran parte coinciden con las del Ag y Au, en realidad las nanopartículas de cobre (CuNPs) son bastante difíciles de sintetizar por una característica que poseen, la cual es su alta probabilidad de oxidación, por lo que es difícil la preparación y mantenimiento del entorno experimental [21].

1.1 Definición y clasificación de las nanopartículas

Las nanopartículas pueden ser definidas como objetos que tienen sus medidas y dimensiones dentro de la escala nanométrica y que a la vez poseen medidas de ejes que no se diferencian de una a otra por una gran escala como lo menciona la organización internacional de normalización (ISO: *International Organization for Standardization*)) [3].

Son tan pequeñas que es imposible percibirlas para el ojo humano, por lo que su nombre “nano” proveniente del griego “enano” cobra más sentido al ser representado por la mil millonésima parte de un metro [22].

Se clasifican en:

- **Nanopartículas semiconductoras:** Con sus intervalos de energía entre la banda de valencia y su bandgap característica, cuentan con propiedades que se posicionan entre las propiedades de los metales y no metales [23].
- **Nanopartículas poliméricas:** Suelen tener superficies características que benefician la adsorción de otras moléculas a su misma superficie externa y su

composición principalmente se basa en materiales orgánicos contando con formas que se acercan a las nano esferas [23].

- **Nanopartículas basadas en carbón:** Entre sus principales estructuras se encuentran los fullerenos y los nanotubos de carbono (NTC), los primeros se constituyen por formas de jaulas cóncavas en su interior y se caracterizan por su gran conductividad eléctrica, afinidad electrónica y resistencia, y las segundas como su nombre lo indica, tienen forma de tubos y pueden tener características diferentes como pared doble (DWNT: *Double Wall Nano Tubes*), pared simple (SWNT: *Simple Wall Nano Tubes*) o pared múltiple (MWNT: *Multiple Wall Nano Tubes*) [23].
- **Nanopartículas metálicas:** Como se puede intuir la composición de estas nanopartículas es el metal y comúnmente se han usado en diversos campos como lo son la ciencia y la medicina por sus características ópticas y por sus propiedades como lo son la resonancia plasmónica superficial localizada (LSPR: *Localized Surface Plasmon Resonance*). Estas poseen propiedades de LSPR, un fenómeno óptico que es generado por una onda de luz dentro de una nanopartícula conductora, en la región visible del espectro electromagnético solar existe una amplia banda de absorción, en la que permanecen las nanopartículas (NP) de metales nobles, como Cobre (Cu), Plata (Ag) y Oro (Au) [23].
- **Nanofibras de carbono:** Este tipo de nanopartículas tienen grandes propiedades conductoras eléctricas, y térmicas, además de poseer al mismo tiempo excelentes propiedades mecánicas. Están compuestas de hojas de grafeno y tienen formas de capas, platos, copas o conos que se apilan, teniendo diámetros de entre 10 a 500 nm, se usan principalmente en industrias como la fotocatálisis, los dispositivos energéticos, sensores, la administración compleja de medicamentos y los nanocompuestos [23].
- **Nanopartículas de una dimensión:** Son láminas muy delgadas o superficies con espesores de 1 a 100 nm, se usan comúnmente en celdas solares, catálisis o sistemas de hardware de almacenamiento de información [23].

- **Nanopartículas de dos dimensiones:** Este tipo de nanopartículas poseen propiedades mecánicas, eléctricas y físicas, un ejemplo de estas NPS son los nanotubos de carbono (NTC) [23].

-

1.2 Metales nobles y sus principales características (Au, Ag, Pt, Pd)

17

Este tipo de metales son fáciles de identificar gracias a sus colores característicos que comúnmente se usan para describir sus mismos colores y también gracias a que desde hace muchos años se han usado para la creación de artículos varios, desde la joyería hasta monedas acuñadas, así mismo por sus colores el oro y el cobre son fáciles de identificar por ser metales con colores fuera de lo común como lo es el “plateado” o gris [24]. Sus aplicaciones han sido extensas durante el paso de los años, siendo las principales la medicina y salud, la electrónica y la fabricación de artefactos, esto lo permiten sus apreciadas características como lo son la conductividad eléctrica y térmica y su alta resistencia a la corrosión y oxidación, características, en el caso del oro por su ordenamiento electrónico no reactivo y estable y por el contrario, la plata es más reactiva que el oro pero al mismo tiempo tiene mayor resistencia a la corrosión, que solo cede ante el contacto con sustancias con contenido de azufre y a altas temperaturas, por otro lado los metales como el platino y el paladio también muestran gran resistencia a la oxidación y corrosión [25].

Como se menciona anteriormente, la plata ha demostrado que posee gran conductividad eléctrica, esto es debido a su estructura y su densidad de electrones libres, lo que da paso a un poco resistencia en el transporte de electrones, siendo así junto con el oro gran opción para su uso en conectores confiables y conexiones eléctricas por su larga durabilidad y confiabilidad. El oro, la plata y el platino son conocidos por sus usos en la joyería, lo que se logra por sus propiedades mecánicas como lo son la resistencia a la tracción, que mide la capacidad del metal para soportar el estiramiento o tracción sin sufrir roturas o daños[25].

Otro uso de este tipo de metales ha sido por un tiempo en el área de los catalizadores, lo que se logra por sus capacidades para formar óxidos que logran determinar el mecanismo de reacción de una reacción, así como su velocidad en el proceso dependiendo de la reactividad.

Dependiendo de su uso o condiciones esto puede ser bueno o malo para su uso en la optimización de procesos y reacciones [26].

1.3 Posición de la RPS (Resonancia de Plasmón Superficial)

La RPS es un fenómeno en el que un haz de luz polarizada plana, cercana a la luz que vemos comúnmente, incide sobre una capa muy delgada de metal que puede ser oro, plata o cobre semitransparente que se posiciona sobre un prisma con un alto índice de refracción (IR). Cuando alcanza un ángulo específico de incidencia (q) o ángulo crítico, esta superficie metálica absorbe la luz y se transfiere su energía a los electrones que a su vez oscilan en conjunto dando lugar a los llamados plasmones superficiales (PS) [27].

El uso de un prisma con alto índice de refracción es de gran importancia en este fenómeno, ya que la luz polarizada plana que incide sobre el metal y el material dieléctrico necesitan de un ángulo específico, los plasmones superficiales se propagan en forma de ondas con estas condiciones y viajan a lo largo de la superficie [28]. La resonancia de plasmón superficial necesita de elementos ópticos como prismas para que la energía y momento de la luz incidente coincidan con los de los plasmones, estos prismas a su vez permiten que se ajuste el momento de la luz que incide. La luz y los plasmones interactúan principalmente por el ángulo en el que se logra alcanzar la resonancia, el cual maximiza la interacción al propagar la luz de forma casi paralela a la superficie metálica [29], [28].

Dependiendo del material, el índice de refracción y el tamaño de la NP, se pueden predecir propiedades como la intensidad, que aumenta proporcionalmente con el volumen y disminuye con pérdidas eléctricas, y el ancho de banda que puede cambiar su forma, estas características de la RPS se pueden estudiar para NPs esféricas mediante el uso de la **teoría de Mie**, la cual proporciona una solución analítica para las ecuaciones de Maxwell cuando la luz incide sobre una partícula esférica. Magnitudes como la absorción, la dispersión y la sección eficaz de extinción de la partícula se pueden calcular fácilmente con la teoría de Mie [4].

Evalúa las secciones eficaces de absorción y dispersión de las NPs y, en consecuencia, simula sus propiedades ópticas, el potencial escalar ($\Delta\Phi = 0$) en la fórmula de Laplace se emplea para determinar la polarizabilidad isotrópica (α) de una nanopartícula esférica con permitividad específica (ε_1) y radio (a) delimitada por un medio con permitividad específica (ε_2):

$$\alpha = 4\pi a^3 \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2}$$

Las secciones eficaces de dispersión o esparcimiento ($C_{sca}(\omega)$) y absorción ($C_{abs}(\omega)$) se evalúan conociendo la potencia total de radiación y absorción del dipolo, de acuerdo con las siguientes relaciones:

$$C_{sca}(\omega) = \frac{k^4}{6\pi} |\alpha(\omega)|^2$$

$$C_{abs}(\omega) = k \text{Im}[\alpha(\omega)]$$

Donde: k es el vector de onda entrante. Conociendo la sección eficaz de extinción ($C_{ext}(\omega)$), dada por:

$C_{ext}(\omega) = C_{sca}(\omega) + C_{abs}(\omega)$, la teoría de Mie aproxima la polarizabilidad de una esfera con volumen (V) como:

$$\alpha = \frac{[1 - 0.1(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)q^2]V_{AuNPs}}{\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} + \frac{1}{3}\right) - \left[(\varepsilon_1 + 10\varepsilon_2)\left(\frac{q^2}{30}\right)\right] - 4i\pi^2(\varepsilon_2)^{\frac{3}{2}} \frac{V_{AuNPs}}{3\lambda^3}}$$

Donde: q es una variable adimensional dada por:

$$q = \pi \frac{d_{AuNPs}}{2\lambda} [4].$$

1.4 Definición e importancia del machine learning

El Machine learning (ML) se refiere a un área de la Inteligencia artificial en el que conjuntos de algoritmos logran el reconocimiento y predicción de datos, patrones e indicaciones y así sin necesidad de una programación explícita previa dan respuestas basadas

en datos anteriores [30]. En esta rama de la IA está muy presente la estadística y la optimización, ya que se le da gran uso para la extracción de patrones y rutinas a partir de conjuntos grandes de datos [31].

Las máquinas de vectores de soporte (SVM) que gestionan tareas de clasificación básicas son uno de los primeros avances de aprendizaje automatizado, este aprendizaje que con el paso de los años ha evolucionado tanto al punto de la realización de redes neuronales convolucionales (CNN: *Convolutional Neural Network*), que logran procesar datos, imágenes en tareas de visión artificial y los modelos de lenguaje de gran tamaño (LLM: *Large Language Model*) que logran generar lenguaje de propósito general [32].

Su uso ha sido guiado hacia diferentes ámbitos para mejora de la sociedad y como solución a algunas problemáticas como lo es en el área de la medicina en el desarrollo de neuroprótesis para diversos trastornos y discapacidades neurológicas [33], así como su uso como método de análisis de durabilidad de materiales basándose en su ciclo de vida [30] y en la eléctrica, ofreciendo alternativas para la optimización de sistemas y ahorro de energía [34].

1.5 Tipos de aprendizaje automático

Este tipo de aprendizaje desglosa las posibles soluciones a un problema y después considera los impedimentos y restricciones agrupadas para lograr una solución coherente con el tipo de problema y los datos previamente recopilados, el aprendizaje automático puede disminuir el costo de mano de obra y lleva a más usuarios el proceso de aprendizaje automatizado [32].

1.5.1 Aprendizaje supervisado

El aprendizaje supervisado es un método de aprendizaje automático que aprende o establece un modelo a partir de un conjunto de entrenamiento etiquetado y predice nuevas instancias basándose en este modelo [35]. El conjunto de entrenamiento se compone de una

serie de datos etiquetados, donde los datos son la entrada y la etiqueta correspondiente es el resultado esperado. El objetivo es predecir el resultado de una función para cualquier entrada posible tras observar datos de entrenamiento; el aprendiz debe generalizar de forma razonable a la situación de los nuevos ejemplos a partir del conjunto de entrenamiento existente. En la percepción humana y animal, esto suele denominarse aprendizaje de conceptos [36].

1.5.2 Aprendizaje no supervisado

A diferencia del aprendizaje supervisado que consiste en realizar tareas con un objetivo claro y, al implementarlas repetidamente, el resultado alcanza dicho objetivo, el aprendizaje no supervisado consiste en realizar tareas sin un objetivo claro, pero al ejecutarlas repetidamente, se alcanza un resultado final debido a hábitos o preferencias personales, se descubren las similitudes entre las tareas. El aprendizaje no supervisado se utiliza para resolver diversos problemas de reconocimiento de patrones basados en muestras de entrenamiento cuyas categorías se desconocen [36].

1.5.3 Aprendizaje por refuerzo

El aprendizaje por refuerzo se compone principalmente de agentes inteligentes y el entorno. El agente inteligente representa al sujeto con capacidades de comportamiento, como personas, autos, etc.; el entorno se refiere al escenario donde se encuentra el agente inteligente, como el tráfico donde se encuentra el vehículo. El agente inteligente realiza diversas acciones en el entorno, y este le proporciona retroalimentación basada en las recompensas o castigos correspondientes [36].

1.6 Algoritmos de machine learning más utilizados

1.6.1 Regresión lineal y no lineal

La regresión lineal es un modelo matemático que se basa en funciones lineales con una o varias entradas y una salida. La regresión lineal es uno de los modelos más simples, pero con más flexibilidad basándose en datos y estimaciones. Estudia la relación entre una característica $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}$, y otra característica $y_1, \dots, y_n \in \mathbb{R}$. Su resultado principalmente es una ecuación que conecta X , la variable oculta a $x_1, \dots, x_n$, y Y , la variable oculta a $y_1, \dots, y_n$ [37].

La regresión no lineal es un Modelo matemático utilizado para determinar la relación entre variables dependientes e independientes por medio de ecuaciones. Hace uso de funciones exponenciales, polinómicas o logarítmicas pero su forma más simple se presenta de la siguiente forma: $Y = f(X, \beta) + \epsilon$, en la que β representa los parámetros que serán calculados y ϵ representa términos de error, permite desarrollar modelos con relaciones entre variables dependientes e independientes. También hace uso de algoritmos de estimación iterativa como el algoritmo de Gauss-Newton, el algoritmo de gradiente decreciente, el algoritmo de mínimos cuadrados no lineal y el algoritmo de Levenberg-Marquardt [38].

1.6.2 Árboles de decisión y Random Forest

Los árboles de decisión (DTC: *Decision Tree Classifier*) son uno de los métodos de clasificación más usados para clasificar y estructurar datos de aprendizaje estadístico, principalmente se realizan con base en heurísticas y se representan jerárquicamente haciendo uso de secuencias de decisión(pruebas) para obtener como resultado una predicción o una clase específica. Se construye específicamente con una estructura bien pensada y tiene como objetivo seleccionar el orden más acertado y estructurado para que el tamaño del mismo sea el más pequeño posible [38].

El algoritmo de Random Forest (RF) se compone principalmente de dos fases, las cuales son la fase de entrenamiento (aprendizaje) y la fase de clasificación, este algoritmo se compone de un conjunto de árboles de decisión y es por eso que forma parte del mismo conjunto de métodos [39]. Está compuesto por el muestreo Bootstrap con el que se construyen los árboles de decisión que a su vez usan predictores aleatorios y predicciones de cada uno de los otros árboles para realizar predicciones con respecto a la mayoría de las decisiones para así clasificar o usa también el promedio [39].

1.6.3 Máquinas de soporte vectorial (SVM)

Son sistemas que tienen la capacidad de clasificar datos con diferentes características tabulares y no tabulares y al mismo tiempo pueden gestionar estos mismos datos [40]. Las SVM han logrado resolver eficazmente problemas de optimización convexa con su gran rendimiento en el área de la clasificación para obtener soluciones optimas [41].

1.6.4 Redes neuronales artificiales

Los algoritmos de redes neuronales artificiales (RNA) o redes neuronales (NN: *Neuronal Network*) han sido de utilidad en estimaciones y resolución de problemas por su enfoque en el aprendizaje automático así como en el campo de las energías renovables, biodiesel, la industria automotriz y en el área de la salud. Las redes neuronales artificiales recopilan datos para formar una base de datos que sirve para el aprendizaje automático y entrenamiento para el proceso de modelado y se usan para resolver futuros problemas [42]. Las redes neuronales artificiales (RNA) simulan principalmente las células nerviosas reales que trabajan recibiendo, procesando y transmitiendo información, estas redes se construyen con el fin de recordar esta misma información y llegar a la capacidad de recordar situaciones y automáticamente unificar los conocimientos adquiridos [43].

1.7 Software MiePlot

MiePlot fue diseñado originalmente para proporcionar una interfaz simple (para PC que usan Microsoft Windows) para el clásico algoritmo BHMIE (*Bohren–Huffman Mie code*) para la dispersión de Mie por una esfera. Además de los cálculos de dispersión de Mie para longitudes de onda individuales, MiePlot ofrece cálculos de dispersión de la luz solar y simulaciones de efectos ópticos atmosféricos (como arcoíris, coronas y glorias). MiePlot también ofrece la opción de realizar cálculos mediante la serie de Debye. Si bien la teoría de Mie proporciona una solución matemática exacta al problema de la dispersión de ondas electromagnéticas desde una esfera homogénea, no proporciona información sobre los procesos físicos involucrados en la dispersión [44].

CAPÍTULO II

Metodología

24

2.1 Determinación de las eficiencias ópticas de nanopartículas esféricas de plata, oro y cobre

Para determinar la posición de la RPS de las nanopartículas con diferente radio se empleó el software MiePlot, que simula la dispersión y absorción de la luz de objetos, basado en la teoría de Mie.

Para realizar el cálculo de las eficiencias ópticas, es necesario especificar en MiePlot la morfología de la partícula, función dieléctrica, índice de refracción del medio, la tolerancia para el método numérico, la polarización de la onda electromagnética plana que se propaga en la dirección x , así como el intervalo de longitudes de onda en el cual se desea calcular las eficiencias ópticas. Se realizaron cálculos para partículas esféricas de oro, plata y cobre con diferentes radios (de 5 nm a 151 nm), dispersas en un agua (índice de refracción de 1.33).

2.2 Implementación de algoritmos de aprendizaje de máquina

El radio de las nanopartículas se utilizó como variable predictora, mientras que la intensidad del modo dipolar se utilizó como variable a predecir. Para el entrenamiento, la validación y la prueba de los modelos ML, se crearon dos particiones del conjunto de datos, un conjunto de entrenamiento (75%) y un conjunto de prueba (25%).

Se evaluaron los modelos ML mediante validación cruzada. Las métricas de evaluación que se emplearon para evaluar la calidad de los modelos de ML fueron: el coeficiente de determinación (R^2), el error absoluto medio (MAE: *Mean Absolute Error*) y la raíz cuadrada del error cuadrático medio (RMSE: *Root Mean Squared Error*).

2.3 Descripción del Conjunto de Datos y Preprocesamiento.

La investigación se fundamenta en un conjunto de datos riguroso (observaciones por metal) derivado de la Teoría de Mie, que describe la interacción de ondas electromagnéticas planas con partículas esféricas.

- **Dominio del Estudio:** Nanopartículas de Oro (Au), Plata (Ag) y Cobre (Cu) en medio acuoso (IAPWS: *Association for the Properties of Water and Steam*).
- **Variable Predictora:** Radio geométrico de la nanopartícula, discretizado en el intervalo de nm con pasos de 2 nm.
- **Variable Objetivo:** Eficiencias de Extinción, Absorción y Dispersión (Esparcimiento) máximas, correspondientes a la amplitud del pico de resonancia dipolar.
- **Normalización de Datos:** Antes de la ingestión por los algoritmos, la variable predictora fue sometida a una estandarización Z-score para asegurar la estabilidad numérica, transformando la distribución para obtener una media y una desviación estándar:

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

Donde:

x = valor original

μ = media de la muestra

σ = desviación estándar de la muestra

z = valor estandarizado

2.4 Protocolo de Partición y Validación (k-Fold Cross-Validation)

Para evitar el sesgo estadístico inherente a una única división de datos (método hold-out), especialmente con un tamaño de muestra moderado, se implementó un protocolo de Validación Cruzada de k-Pliegues. El procedimiento algorítmico fue el siguiente:

1. **Aleatorización:** El conjunto de datos completo se permutó aleatoriamente para eliminar cualquier correlación debida al orden secuencial del radio.
2. **Segmentación:** Los datos se dividieron en subconjuntos (pliegues) disjuntos de tamaño aproximadamente igual (muestras por pliegue).
3. **Proceso Iterativo:** Se ejecutaron 5 ciclos de entrenamiento y evaluación independientes:
4. En la iteración, el pliegue se reservó como Conjunto de Validación (20% de los datos) para pruebas ciegas.
5. Los pliegues restantes se concatenaron para formar el Conjunto de Entrenamiento (**80% de los datos**).
6. **Agregación de Resultados:** Las métricas finales reportadas corresponden al promedio aritmético de las 5 iteraciones. Este enfoque garantiza que cada nanopartícula simulada haya sido utilizada tanto para entrenar al modelo como para validarlo, proporcionando una estimación robusta e insesgada del error de generalización.

2.5 Métricas de Desempeño

La evaluación cuantitativa se basó en tres indicadores clave, seleccionados por su relevancia física:

1. **Coefficiente de Determinación (R^2):** Mide la bondad de ajuste global. Representa la proporción de la varianza en la eficiencia óptica que es predecible a partir del radio.

- *Interpretación:* Un valor cercano a 1.0 indica que el modelo captura perfectamente la física del fenómeno. Valores negativos indican un modelo no representativo.
2. **Error Absoluto Medio (EAM / MAE):** Calcula la magnitud promedio de los errores en las mismas unidades que la variable objetivo (adimensional). Es una métrica lineal que no penaliza excesivamente los valores atípicos.
- *Relevancia:* Nos indica, en promedio, qué tan lejos está la predicción de la eficiencia real.
3. **Raíz del Error Cuadrático Medio (RECM / RMSE):** Es la métrica más crítica para aplicaciones científicas. Al elevar las diferencias al cuadrado antes de promediar, penaliza severamente los errores grandes.
- *Justificación:* En nanoplasmónica, predecir erróneamente un pico de resonancia (un error grande) es mucho más grave que tener pequeños errores sistemáticos. Un RECM bajo garantiza que no existen desviaciones "catastróficas" en el modelo.

CAPÍTULO III

Resultados y Discusión

3.1 Evaluación Global de los Modelos de Regresión

La capacidad de predecir la intensidad del máximo del modo dipolar (eficiencias de extinción, esparcimiento y absorción) se evaluó mediante tres métricas fundamentales: el Coeficiente de Determinación (R^2), la Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE) y el Error Absoluto Medio (MAE).

De manera general, se observa que la Regresión Lineal (LR: *Linear Regression*) presenta un desempeño subóptimo en todos los sistemas, con valores de R^2 que oscilan entre **0.71 y 0.81**. Físicamente, esto se debe a que las secciones eficaces ópticas escalan de forma no lineal con el radio (r) de la partícula: la absorción domina en el régimen de Rayleigh ($Q_{abs} \propto r$) mientras que el esparcimiento crece drásticamente en el régimen de Mie ($Q_{sca} \propto r^6$). Un modelo lineal es incapaz de mapear esta transición de potencias, lo que se traduce en los elevados valores de RMSE (superiores a **0.32**) observados en los tres materiales.

3.2. Discusión por Material

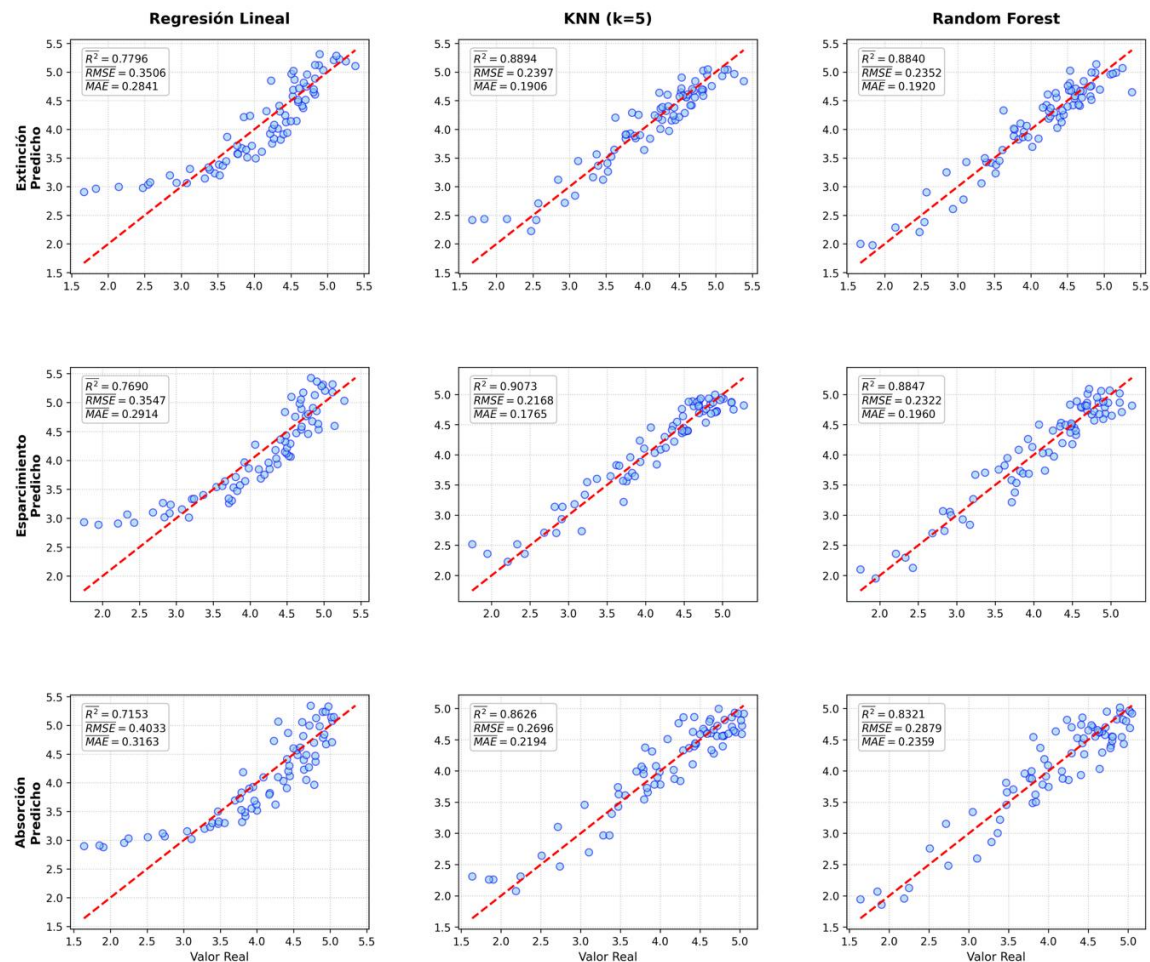
3.2.1 Nanopartículas de Plata (Ag)

La plata exhibe las resonancias más intensas debido a sus bajas pérdidas dieléctricas. No obstante, esta misma sensibilidad genera una alta varianza en los datos.

- **Análisis de Métricas:** El modelo de k vecinos más cercanos (KNN: *K-Nearest Neighbors*) ($k=5$) logra un $R^2=0.8894$ para la extinción, reduciendo el MAE a **0.1906** en comparación con el **0.2841** de la regresión lineal.

- Interpretación Física:** El error residual en la plata suele concentrarse en los valores máximos de eficiencia. Dado que el pico dipolar de la plata es extremadamente estrecho (alto factor de calidad), pequeñas variaciones en el diámetro provocan cambios abruptos en la intensidad. Los modelos como Random Forest ($R^2=0.8840$) capturan mejor estas discontinuidades en la pendiente de la eficiencia que los modelos globales.

Predicción de Eficiencias: Plata (Métricas Promedio de 5-Folds)

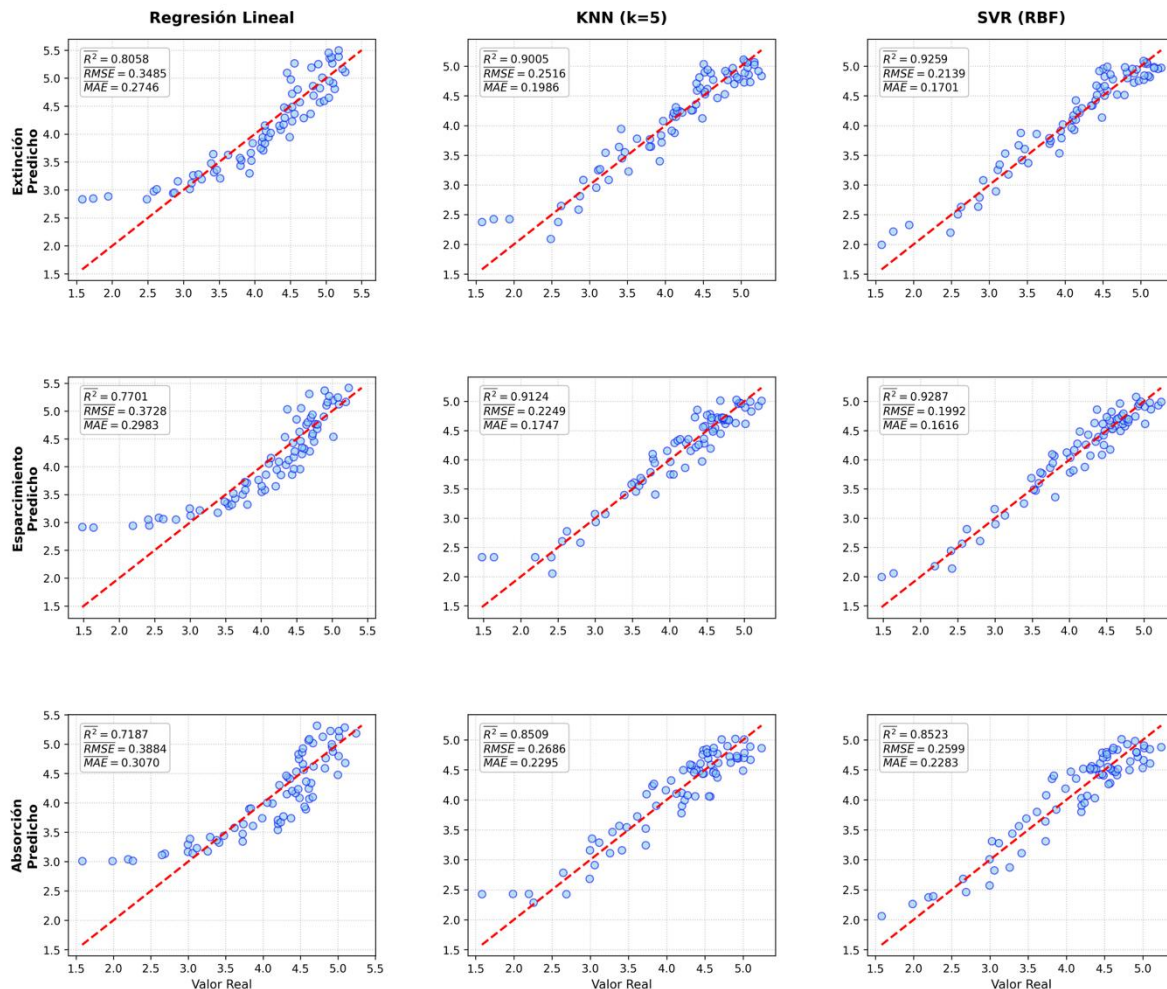


3.2.2 Nanopartículas de Oro (Au)

El sistema de oro es el que presenta los mejores resultados de ajuste en este estudio, especialmente mediante el uso de la regresión por vectores de soporte usando un kernel de función de base radial (SVR: *Support Vector Regression* (RBF: *Radial Basis Function*)).

- **Análisis de Métricas:** El SVR alcanza un R^2 excepcional de **0.9259** para la extinción y un RMSE mínimo de **0.2139**.
- **Interpretación Física:** La respuesta del oro está influenciada por las transiciones interbanda. El bajo MAE (**0.1701**) indica que el modelo es altamente fiable para el diseño de nanomedicina, donde la precisión en la longitud de onda y la intensidad es vital.

Predicción de Eficiencias: Oro (Métricas Promedio de 5-Folds)



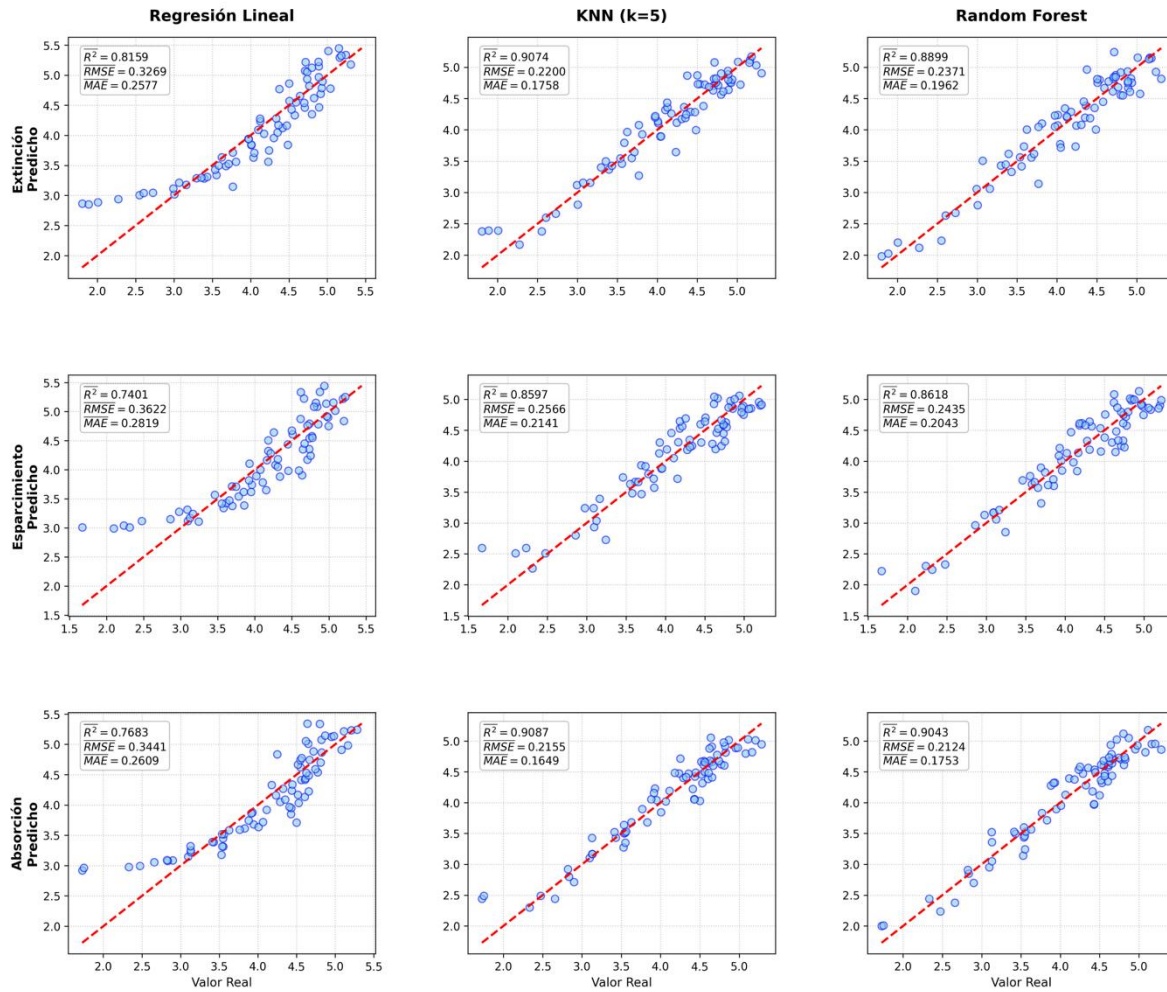
3.2.3 Nanopartículas de Cobre (Cu)

El cobre presenta un reto mayor debido a su fuerte absorción intrínseca y su respuesta plasmónica más amortiguada.

31

- **Análisis de Métricas:** Sorprendentemente, el KNN muestra un desempeño robusto en la Absorción con un $R^2=0.9087$ y un RMSE=0.2155.
- **Interpretación Física:** En el cobre, el modo dipolar está dominado por la absorción en un rango de tamaños más amplio que en la plata. Al ser la absorción una función más "monótona" y menos dependiente de la dispersión de fase que el esparcimiento, los algoritmos basados en proximidad como KNN logran interpolar los valores con gran precisión, logrando errores absolutos medios muy bajos (MAE=0.1649).

Predicción de Eficiencias: Cobre (Métricas Promedio de 5-Folds)



3.2 Importancia de la Intensidad del Modo Dipolar

El modo dipolar no es simplemente un pico en un espectro; representa la oscilación colectiva de los electrones en fase con la luz incidente. Predecir su intensidad es crucial por las siguientes razones:

1. **Cuantificación del Campo Cercano:** Existe una relación directa entre la intensidad de la eficiencia de extinción y el factor de realce del campo eléctrico en la superficie de la partícula. Sin un modelo predictivo de la intensidad, es complicado diseñar sustratos eficientes.

2. **Sintonía Fototérmica:** Para aplicaciones donde se requiere convertir luz en calor, la predicción de Q_{abs} es el parámetro de diseño maestro. Estos modelos permiten identificar el tamaño exacto donde una nanopartícula de oro o cobre maximiza la conversión de energía.
3. **Optimización de Biosensores:** En sensores LSPR, la magnitud del cambio en la señal depende de qué tan intenso sea el pico original. Los modelos con $R^2 > 0.90$ aquí presentados permiten predecir la viabilidad de un sensor antes de sintetizar el material.

En comparación con lo obtenido, se muestra que los modelos SVR (RBF) y KNN se desempeñan dependiendo de la respuesta plasmónica de cada metal y sus características físicas. Mientras que SVR construye una función de regresión global suavizado con un kernel RBF, KNN realiza una interpolación local basada en la comparación entre muestras. Aunque ambos son capaces de capturar relaciones no lineales, lo hacen de formas muy distintas, esto demuestra que no hay un modelo único específico para cada sistema existente.

Se observa que cuando existe una intensidad del modo dipolar que está influenciada por las transiciones interbanda, como sucede en el caso de las AuNPs, además de presentarse una variación no lineal pero relativamente continua con el tamaño, el modelo SVR logra una mejor generalización. Los altos valores obtenidos de R^2 y sus bajos promedios de error se dan debido a su representación efectiva de contribuciones electrónicas complejas, siendo así adecuado para problemas que requieren alta precisión predictiva.

Por otro lado, para Ag y Cu, KNN muestra un mejor desempeño, ya que no impone una forma funcional global y logra interpolar con mayor confiabilidad las regiones del espacio de parámetros donde existen pequeñas variaciones geométricas que producen cambios significativos en la intensidad del modo dipolar, este modelo funciona mejor para estos metales ya que en estos la respuesta óptica muestra variaciones locales más pronunciadas por su alto factor de calidad en Ag y por el carácter de absorción predominante en Cu. Es por esto que debe ser de gran importancia la selección del modelo a usar tomando en cuenta la física profunda del sistema.

3.3. Aplicaciones en Ingeniería y Nanotecnología

Los modelos desarrollados tienen aplicaciones directas en:

- **SERS (*Surface-Enhanced Raman Spectroscopy*):** El realce de la señal Raman es proporcional a la cuarta potencia del campo eléctrico local. Predecir el máximo dipolar permite maximizar este realce para detectar moléculas individuales.
- **Fotocatálisis Plasmónica:** En procesos químicos, la intensidad del modo dipolar determina la tasa de generación de "portadores calientes" (*hot carriers*), los cuales aceleran reacciones químicas en la superficie del metal.
- **Diseño de Celdas Solares:** Maximizar el esparcimiento (Q_{sca}) predicho por los modelos de Random Forest ayuda a atrapar la luz en capas delgadas de semiconductores, aumentando la eficiencia cuántica del dispositivo.

La transición de métricas inadecuadas en modelos lineales ($R^2 \approx 0.75$) a métricas de alta fidelidad en modelos no lineales ($R^2 > 0.90$) valida el uso de Inteligencia Artificial como un "metamodelo" de la Teoría de Mie. El uso de SVR para oro y KNN para cobre y plata proporciona una herramienta de diseño con un MAE inferior a **0.2**, lo cual es suficientemente preciso para la implementación en protocolos de fabricación industrial y diagnóstico médico.

CONCLUSIONES

En este trabajo se ha demostrado que la intensidad de modo dipolar y su predicción constituyen un problema naturalmente no lineal y que está estrechamente relacionado con los regímenes físicos descritos por la teoría de Mie. Se pudo observar con los resultados obtenidos que los modelos de regresión lineal no son suficientemente adecuados para capturar la transición entre absorción y esparcimiento dominante, lo que nos muestra la necesidad de usar modelos diferentes y más flexibles.

El implementar técnicas de aprendizaje automático permitió hacer a un lado las limitaciones y lograr altos niveles de precisión en la estimación de eficiencias ópticas. Los modelos que se usaron (SVR (RBF) y KNN) mostraron un buen desempeño con coeficientes de determinación superiores a 0.90 y RMSE reducidos.

Podemos concluir que el ML se posiciona como una herramienta complementaria y eficiente a la teoría de Mie y sus aplicaciones, con la capacidad de participar en el modelo y optimización de nanopartículas plasmónicas. Se puede hacer uso de ella y perfeccionar su mismo uso para predecir con eficacia la intensidad de modo dipolar de nanopartículas esféricas de Au, Ag y Cu, esto abre nuevas oportunidades para el diseño de dispositivos en diversas áreas como la medicina, la fotocatalisis y tal vez reduciendo el costo de métodos tradicionales.

REFERENCIAS

- [1] F. Berzal, “Redes neuronales & deep learning,” *Independently published*, vol. II, 2019.
- [2] A. L. G. J. A. Arzola-Flores, “Machine Learning for Predicting the Surface Plasmon Resonance of Perfect and Concave Gold Nanocubes,” *Journal of physical chemistry*, vol. 124, no. 46, pp. 25447–25454, Nov. 2020.
- [3] N. Joudeh and D. Linke, “Nanoparticle classification, physicochemical properties, characterization, and applications: a comprehensive review for biologists,” Dec. 01, 2022, *BioMed Central Ltd.* doi: 10.1186/s12951-022-01477-8.
- [4] F. Y. Alzoubi, A. A. Ahmad, I. A. Aljarrah, A. B. Migdadi, and Q. M. Al-Bataineh, “Localize surface plasmon resonance of silver nanoparticles using Mie theory,” *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 34, no. 32, Nov. 2023, doi: 10.1007/s10854-023-11304-x.
- [5] J. Liu, “Scanning transmission electron microscopy and its application to the study of nanoparticles and nanoparticles systems,” *Microscopy*, vol. 54, no. 3, pp. 251–278, Jun. 2005.
- [6] M. M. Eid, “Characterization of Nanoparticles by FTIR and FTIR-Microscopy,” *Handbook of Consumer Nanoproducts*, Jan. 2021.
- [7] A. G. Shard, R. C. Schofield, and C. Minelli, “Ultraviolet–visible spectrophotometry,” in *Characterization of Nanoparticles*, Elsevier, 2020, pp. 185–196. doi: 10.1016/B978-0-12-814182-3.00012-2.
- [8] D. K. Bhui, H. Bar, P. Sarkar, G. P. Sahoo, S. P. De, and A. Misra, “Synthesis and UV-vis spectroscopic study of silver nanoparticles in aqueous SDS solution,” *J. Mol. Liq.*, vol. 145, no. 1, pp. 33–37, Mar. 2009, doi: 10.1016/j.molliq.2008.11.014.
- [9] W. Haiss, N. T. K. Thanh, J. Aveyard, and D. G. Fernig, “Determination of size and concentration of gold nanoparticles from UV-vis spectra,” *Anal. Chem.*, vol. 79, no. 11, pp. 4215–4221, Jun. 2007, doi: 10.1021/ac0702084.
- [10] A. Zielińska, E. Skwarek, A. Zaleska, M. Gazda, and J. Hupka, “Preparation of silver nanoparticles with controlled particle size,” in *Procedia Chemistry*, Nov. 2009, pp. 1560–1566. doi: 10.1016/j.proche.2009.11.004.

- [11] S. Behzadi *et al.*, "Determination of nanoparticles using UV-Vis spectra," *Nanoscale*, vol. 7, no. 12, pp. 5134–5139, 2015, doi: 10.1039/C4NR00580E.
- [12] W. Liu, H. Ge, X. Ding, X. Lu, Y. Zhang, and Z. Gu, "Cubic nano-silver-decorated manganese dioxide micromotors: enhanced propulsion and antibacterial performance," *Nanoscale*, vol. 12, no. 38, pp. 19655–19664, 2020, doi: 10.1039/D0NR06281B.
- [13] Y. Liu, S. H. Wu, X. Y. Du, and J. J. Sun, "Plasmonic Ag nanocube enhanced SERS biosensor for sensitive detection of oral cancer DNA based on nicking endonuclease signal amplification and heated electrode," *Sens. Actuators B Chem.*, vol. 338, Jul. 2021, doi: 10.1016/j.snb.2021.129854.
- [14] S. Marimuthu *et al.*, "Silver nanoparticles in dye effluent treatment: A review on synthesis, treatment methods, mechanisms, photocatalytic degradation, toxic effects and mitigation of toxicity," *J. Photochem. Photobiol. B*, vol. 205, Apr. 2020, doi: 10.1016/j.jphotobiol.2020.111823.
- [15] H. Liang, W. Wang, Y. Huang, S. Zhang, H. Wei, and H. Xu, "Controlled Synthesis of Uniform Silver Nanospheres," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 114, no. 16, pp. 7427–7431, Apr. 2010, doi: 10.1021/jp9105713.
- [16] N. Cathcart, N. Coombs, I. Gourevich, and V. Kitaev, "Synthesis and sensing properties of D_{5h} pentagonal silver star nanoparticles," *Nanoscale*, vol. 8, no. 43, pp. 18282–18290, 2016, doi: 10.1039/C6NR07397B.
- [17] B. Khodashenas and H. R. Ghorbani, "Synthesis of silver nanoparticles with different shapes," Dec. 01, 2019, *Elsevier B.V.* doi: 10.1016/j.arabjc.2014.12.014.
- [18] X. Xia, J. Zeng, Q. Zhang, C. H. Moran, and Y. Xia, "Recent developments in shape-controlled synthesis of silver nanocrystals," *Journal of Physical Chemistry C*, vol. 116, no. 41, pp. 21647–21656, Oct. 2012, doi: 10.1021/jp306063p.
- [19] T. Fan *et al.*, "Electrochemically Driven Formation of Sponge-Like Porous Silver Nanocubes Toward Efficient CO₂ Electroreduction to CO," *ChemSusChem*, vol. 13, no. 10, pp. 2677–2683, May 2020, doi: 10.1002/cssc.201903558.
- [20] W. de J. Jiménez-Martínez and J. C. Vázquez-Lira, "revisión de nanopartículas de oro: características fisicoquímicas y su respuesta celular en macrófagos," *Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria en Nanociencias y Nanotecnología*, vol. 17, no. 33, p. e69801, Nov. 2024, doi: 10.22201/ceiich.24485691e.2024.33.69801.
- [21] L. Argueta-Figueroa *et al.*, "Study of antibacterial and cytotoxic properties of copper nanoparticles obtained through a novel approach," *Discov. Mater.*, vol. 5, no. 1, Dec. 2025, doi: 10.1007/s43939-025-00394-5.

- [22] U. Dirección General de Divulgación de la Ciencia, “¿Qué son las nanopartículas?,” fundación unam. Accessed: Jan. 07, 2026. [Online]. Available: <https://www.fundacionunam.org.mx/aviso-de-privacidad/>
- [23] M. S. Kadam, L. S. Nemade, S. R. Pithalekar, M. V. Mahadik, and V. Burunkar, “Exploring Nanoparticles: Types, Advantages, Challenges, and Applications in Drug Delivery and Technology,” *Biosci. Biotechnol. Res. Asia*, vol. 21, no. 3, pp. 1197–1209, Sep. 2024, doi: 10.13005/bbra/3297.
- [24] T. I. Awan, S. Afsheen, and A. Mushtaq, *Influence of Noble Metal Nanoparticles in Sustainable Energy Technologies*. in Smart Nanomaterials Technology. Cham: Springer Nature Switzerland, 2025. doi: 10.1007/978-3-031-80983-5.
- [25] M. C. Thomsett, *Precious metals heavy demand beyond the obvious*, 1st edition. in FTPress Delivers. Place of publication not identified: FT Press, 2010.
- [26] R. B. Jordan, *Principles of Inorganic Chemistry: Basics and Applications*. Springer International Publishing, 2024. doi: 10.1007/978-3-031-22926-8.
- [27] N. M. Rubtsov Kirill Ya Troshin Michail I Alymov, “Heat and Mass Transfer Catalytic Ignition of Hydrogen and Hydrogen-Hydrocarbon Blends Over Noble Metals.”
- [28] D. Capelli, V. Scognamiglio, and R. Montanari, “Surface plasmon resonance technology: Recent advances, applications and experimental cases,” Jun. 01, 2023, *Elsevier B.V.* doi: 10.1016/j.trac.2023.117079.
- [29] M. P. Mcoyi, K. T. Mpofu, M. Sekhwama, and P. Mthunzi-Kufa, “Developments in Localized Surface Plasmon Resonance,” Jul. 01, 2025, *Springer*. doi: 10.1007/s11468-024-02620-x.
- [30] M. F. R. C. Monteiro, M. S. Andrade, and R. M. Guedes, “Machine Learning and Deep Learning to Analyze Material Durability,” 2025, *Springer*. doi: 10.1007/s11665-025-12732-y.
- [31] F. Dietrich and W. Schilders, “Scientific machine learning,” *Mathematische Semesterberichte*, vol. 72, no. 2, pp. 89–115, Oct. 2025, doi: 10.1007/s00591-025-00399-4.
- [32] Z. Shen, Q. Yao, Y. Zhang, L. Wei, and H. Zhao, “Automated Machine Learning: From Principles to Practices,” 2018. doi: XXXXXXXX.XXXXXXX.
- [33] Q. Chen, P. Lin, Z. Yu, and G. Pan, “Enabling Neuroprostheses via Machine Learning,” *Machine Intelligence Research*, vol. 22, no. 5, pp. 866–870, Oct. 2025, doi: 10.1007/s11633-025-1571-3.
- [34] M. Xie, “Advanced hybrid machine learning models for enhanced electricity consumption forecasting: integrating MLP, HGBost, and AdaBoost and hybrid

machine learning,” *Electrical Engineering*, vol. 107, no. 11, pp. 14539–14559, Nov. 2025, doi: 10.1007/s00202-025-03277-3.

- [35] J. E. van Engelen and H. H. Hoos, “A survey on semi-supervised learning,” *Mach. Learn.*, vol. 109, no. 2, pp. 373–440, Feb. 2020, doi: 10.1007/s10994-019-05855-6.
- [36] H. Li, M. Z. Feng, Z. Fang Bai, Z. Fang, and B. Blue, “Artificial Intelligence for Drug Design.”
- [37] J. Lederer, “Statistics and Computing A First Course in Statistical Learning With Data Examples and Python Code.”
- [38] S. Messaoud, A. Bradai, S. H. R. Bukhari, P. T. A. Quang, O. Ben Ahmed, and M. Atri, “A survey on machine learning in Internet of Things: Algorithms, strategies, and applications,” Dec. 01, 2020, *Elsevier B.V.* doi: 10.1016/j.iot.2020.100314.
- [39] A. F. Sahitya, M. Kamal, and N. M. Farda, “Assessing the performance of random forest and deep forest algorithms for Mangrove canopy cover mapping using PlanetScope SuperDove imagery,” *Remote Sens. Appl.*, vol. 41, p. 101875, Jan. 2026, doi: 10.1016/j.rsase.2026.101875.
- [40] E. Carrizosa, T. Halskov, and D. Romero Morales, “Wasserstein support vector machine: Support vector machines made fair,” *Eur. J. Oper. Res.*, vol. 329, no. 2, pp. 641–652, Mar. 2026, doi: 10.1016/j.ejor.2025.10.038.
- [41] B. Richhariya and M. Tanveer, “EEG signal classification using universum support vector machine,” *Expert Syst. Appl.*, vol. 106, pp. 169–182, Sep. 2018, doi: 10.1016/j.eswa.2018.03.053.
- [42] B. P. Adedeji and A. Zaidi, “Radial basis function and feedforward backpropagation artificial neural networks for electric vehicles daily energy consumption and battery capacity estimations,” *Next Research*, vol. 2, no. 4, p. 101006, Dec. 2025, doi: 10.1016/j.nexres.2025.101006.
- [43] B. Gręziak and A. Białowiec, “Optimization of the composting process using artificial neural networks—a literature review,” *Artif. Intell. Rev.*, vol. 58, no. 12, Dec. 2025, doi: 10.1007/s10462-025-11380-x.
- [44] “MiePlot.” Accessed: Jan. 15, 2026. [Online]. Available: <http://www.philiplaven.com/mieplot.htm>