

Estudio teórico de la adsorción del colorante *Reactive Black 5* en un hidrogel de quitosano

Ángel Yupa Contreras¹; Norma Aurea Rangel Vázquez¹; Rosa Elvira Zavala Arce², Yectli A. Huerta³

¹ TecNM/Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Aguascalientes. ² TecNM/Instituto Tecnológico de Toluca.

Estado de México. ³ Minnesota Supercomputing Institute. University of Minnesota, MN, USA.

Área: Ciencias biológicas y ambientales.

Resumen

El colorante *Reactive Black 5* (RB5) es ampliamente utilizado en el sector textil a pesar de que es muy contaminante. ¿Qué opciones se tienen para disminuir la contaminación que se genera? Una solución es el uso de hidrogeles a base de polímeros naturales como el quitosano. El objetivo del presente estudio es utilizar un modelo de química computacional como el método semi-empírico PM3 (Parametric Method 3) para determinar como el colorante RB5 reacciona con el hidrogel. Primero, se diseñaron la molécula del RB5, hidrogel y el sistema RB5/hidrogel en el software HyperChem, enseguida se calculó la geometría de optimización utilizando el algoritmo de Polak-Ribiere, el cual resuelve sistemas de ecuaciones no lineales, finalizado la modelación, mediante la opción Compute, se obtienen las propiedades termodinámicas y QSAR, la opción de visualizar FTIR permite observar los espectros de FTIR de las moléculas individuales y la adsorción respectiva del colorante RB5. Finalmente, se obtuvo el mapa de la distribución electrónica. Los resultados indicaron que la adsorción fue espontánea y exotérmicamente con una energía de -33.47 Kcal/mol. El mecanismo presentó

interacciones de puente de hidrógeno e interacciones n- π , siendo afectados por el tamaño de RB5.

Palabras clave: Colorantes reactivos, adsorción, simulación, RB5, semi-empírico PM3.

Abstract

The Reactive Black 5 (RB5) dye is widely used in the textile industry despite being highly polluting. What options are available to reduce the pollution generated? One solution is the use of hydrogels based on natural polymers such as chitosan. The objective of the present study is to use a computational chemistry model such as the semi-empirical method PM3 (Parametric Method 3) to determine how the dye RB5 reacts with the hydrogel. First, the RB5 molecule, hydrogel, and RB5/hydrogel system were designed in HyperChem software. Next, the optimization geometry was calculated using the Polak-Ribiere algorithm, which solves systems of nonlinear equations. After modeling, the thermodynamic and QSAR properties were obtained using the Compute option. The FTIR visualization option allowed observation of the FTIR spectra of the individual molecules and their respective adsorption of the RB5 dye. Finally, the electronic distribution map was obtained. The results indicated that the adsorption was spontaneous and exothermic with an energy of -33.47

Kcal/mol. The mechanism exhibited hydrogen bonding and $n-\pi$ interactions, which were affected by the size of RB5.

Keywords: Reactive dyes, adsorption, simulation, RB5, PM3 semi-empirical.

Introducción

El agua es un recurso de vital importancia para la vida, pero, ¿Por qué cada día los diferentes cuerpos de agua están más contaminados? Esto se debe a que aproximadamente 10000 colorantes son utilizados diariamente en la industria, papelería, cosmética y farmacéutica, sin embargo, entre el 15 y 50% de los colorantes sintéticos utilizados en procesos de tinte finalizan contaminando el agua (Cortazar-Martínez et al., 2014; Zaruma-Arias et al., 2018; Gallego & Rubio-Clemente, 2022). Los colorantes textiles de mayor demanda son de la familia azo, los cuales tienen uno o más grupos $N=N$ en su estructura (Melgoza-Alemán & Buitrón, 2005).

El colorante negro reactivo 5 (RB5) es un colorante azo de la familia sulfona constituido por cromóforos azoicos, es un colorante muy tóxico y la alta solubilidad en agua en conjunto con los productos de la degradación como aminas produce alergias, ceguera, asma, cáncer, mutaciones en el ser humano (Al-Tohamy et al., 2020; Sarvestani & Doroudi 2020; Cavalcante et al., 2024; Kim et al., 2024). Además, el RB5 no permite el paso de luz en los cuerpos de agua, generando que el nivel de oxígeno disminuye en el medio acuático (Sarvestani & Doroudi 2020).

Pero ¿Existen técnicas que podamos utilizar para solucionar este problema? Se han desarrollado diversos métodos como, biodegradación, ozonización, fotocátalisis, adsorción, intercambio iónico, etc. Sin embargo, la adsorción es el método más empleado debido a la eficiencia, costo, proceso, y al uso de diversos materiales adsorbentes como hidrogeles, arcillas, materiales de carbón y lignocelulósicos (Saroyan et al., 2019). Los hidrogeles son materiales tridimensionales, se obtienen de materiales naturales como quitosano, que debido a su estructura presenta propiedades de biocompatibilidad, biodegradación y nula toxicidad (Thirupathi et al., 2023; Mishra et al., 2024). Los hidrogeles pueden adsorber grandes cantidades de agua sin diluirse, por lo que son utilizados en diversas aplicaciones como medio ambiente, agricultura, entre otras (Aramesh et al., 2021)..

Por otro lado, los avances en la química computacional han permitido disminuir los ensayos de laboratorio y estudiar diversos materiales y condiciones (Bateni et al., 2025; Hira et al., 2023). Los métodos semi-empíricos son adecuados para moléculas medianas y grandes. Estos métodos incorporan parámetros basados en información teórica y/o experimental, para acelerar los cálculos y reducir el error introducido por las simplificaciones. El modelo semi-empírico PM3 representa exactamente los enlaces puente de hidrógeno y obtiene con mayor

precisión los calores de formación, a través de una mejora en el método de optimización.

En los últimos años, se han publicado diversos estudios de la adsorción del colorante RB5, mediante el uso de la química computacional; El Nemr et al. (2014) reportaron las propiedades QSAR de RB5, calculadas mediante el método semi-empírico PM3; Flores López et al. (2018) estudiaron el mecanismo de adsorción de RB5 mediante el cálculo de propiedades QSAR y mapa de potencial electrostático (MPE), con el software HyperChem 8.0.

Por lo tanto, el presente estudio pretende identificar el mecanismo de adsorción de RB5 en un hidrogel quitosano/glutaraldehído mediante el uso de la química computacional.

Materiales y métodos

Los cálculos computacionales se realizaron en una computadora Dell con procesador Intel ® Core i5 – 4460 CPU de 3.20 GHz, con un sistema operativo Window 10 de 64 bits y 8 GB de RAM. Primero, la etapa de modelado en donde se realizaron las modelaciones utilizando el software HyperChem® con el modelo semi-empírico PM3; mediante el algoritmo del gradiente conjugado de Polak-Ribiere y un criterio de convergencia de 0.01 Kcal/(Å.mol) o 10000 ciclos.

Enseguida, la etapa de optimización, en donde el colorante RB5, hidrogel y la adsorción se obtuvieron mediante una pre-optimización inicial, utilizando el comando *Configurational*

Search con el campo de fuerza CHARMM y una posterior optimización.

El hidrogel (Q/G) se representó mediante su oligómero, con un porcentaje de desacetilación del 75%. La estructura se construyó utilizando el comando *Sugar Builder*, que comprende de dos cadenas de quitosano unidas por una molécula de glutaraldehído; las cadenas de quitosano se conformaron de tres anillos GlcN (Glucosamina) y un anillo de GlcNAc (N-acetil-glucosamina) en sus formas isoméricas β -D y unidas mediante un enlace glucosídico 1 $\rightarrow$ 4; posteriormente se optimizó la estructura molecular. El sistema hidrogel-RB5 fue optimizado con las mismas condiciones mencionadas anteriormente.

Finalmente, la etapa de análisis incluyó las siguientes propiedades: las energías moleculares (E_{Enlace} , ΔG y $\Delta H_{\text{form.}}$), las propiedades QSAR (área superficial y volumen), mapas de potencial electrostático (MEP's) y espectros FTIR (visualizado con el software *Spartan'14*). La energía de adsorción ($\Delta E_{\text{Ads.}}$) se calculó con la ecuación (1).

$$\Delta G_{\text{Ads.}} = \Delta G_{\text{Sistema}} - (\Delta G_{\text{Hidrogel}} + \Delta G_{\text{Colorante}}) \quad (1)$$

Resultados y discusión

a) Caracterización del hidrogel Q/G y RB5.

La Tabla 1 muestra que el hidrogel Q/G es más estable que RB5, debido a las múltiples interacciones de puentes de hidrógeno en la estructura, mientras que, la estabilidad de RB5 se atribuye a su extenso sistema conjugado y dos grupos etilsulfona (-S(=O)₂-CH₂-CH₂-) estables.

Además, el hidrogel presenta una mayor área superficial generada por los grupos funcionales hidroxilos y amino.

Tabla 1 Parámetros energéticos y geométricos de los compuestos en estudio.

Propiedades	RB5	Hidrogel Q/G	Referencia
Energías moleculares			
ΔG (kcal/mol)	-	- 504522	- 464183
E_{Enlace} (kcal/mol)	- 8522	- 19665	
$\Delta H_{\text{form.}}$ (kcal/mol)	- 787	- 1666	- 1470
Propiedades QSAR			
Área superficial ($\text{\AA}^2$)	977	1514	11247 y 1320
Volumen ($\text{\AA}^3$)	1852	3276	1997 y 3450

Nota: Elaboración propia.

La Figura 1a, muestran que las zonas de alta densidad electrónica (rojo) se aprecian en los átomos de oxígeno de los grupos $-\text{SO}_3\text{Na}$, $-\text{S}=\text{O}$, $\text{C}=\text{O}$, $-\text{OH}$ y $\text{C}-\text{O}-\text{C}$; mientras que las zonas de baja densidad electrónica (azul) se observan en los átomos de azufre de $-\text{SO}_3\text{Na}$; y en los átomos de hidrógeno de $-\text{NH}_2$, $-\text{NH}$ y $-\text{OH}$. Mientras que la Figura 1b muestra el MPE del hidrogel en donde los átomos de oxígeno y nitrógeno presentan mayor densidad electrónica; además, los átomos de hidrógeno enlazados a los átomos de O y N debido a que poseen una electronegatividad de 3.44 y 3.04, respectivamente, a diferencia del carbono que

posee una electronegatividad menor (2.55); por lo que estos hidrógenos son zonas de baja densidad electrónica.

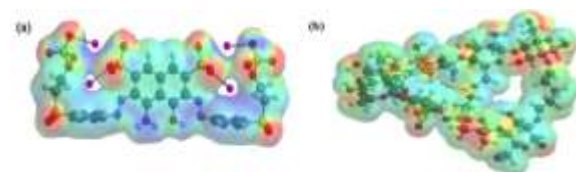


Figura 1. Mapa de potencial electrostático de (a) RB5 y, (b) hidrogel.

Nota: Elaboración propia.

En la Figura 2a se observan las vibraciones de FTIR del colorante RB5: el enlace $-\text{NH}_2$ presentó un estiramiento simétrico, estiramiento asimétrico, flexión en el plano y flexión fuera del plano a 3516, 3408, 1734 y 796 cm^{-1} , respectivamente. El estiramiento del grupo $\text{N}=\text{N}$ se observó a 1885 cm^{-1} . El estiramiento del enlace $\text{C}-\text{N}$ se determinó a 1593 cm^{-1} . El estiramiento del enlace $\text{C}-\text{S}$ se presentó a 721 y 664 cm^{-1} . El estiramiento del grupo $\text{O}=\text{S}=\text{O}$ se localizó a 878 cm^{-1} , mientras que, el estiramiento del grupo $\text{O}-\text{S}=\text{O}$ a 812 y 769 cm^{-1} (Yuen et al., 2005).

Las vibraciones FTIR del hidrogel Q/G se aprecian en la Figura 2b en donde, el estiramiento $\text{O}-\text{H}$ y $\text{N}-\text{H}$ se presentan a 3872 y 3514 cm^{-1} ; respectivamente. El estiramiento simétrico CH se observó a 3172 cm^{-1} , mientras que el estiramiento $\text{C}=\text{O}$ a 1925 cm^{-1} ; el estiramiento $\text{C}=\text{N}$ se apreció a 1866 cm^{-1} ; la flexión NH en el plano correspondió a 1665 cm^{-1} , finalmente, el estiramiento $\text{C}-\text{N}$ fue observado a 1456 cm^{-1} (Pratt et al., 2013; Li et al., 2013; Akakuru & Isiuku, 2017).

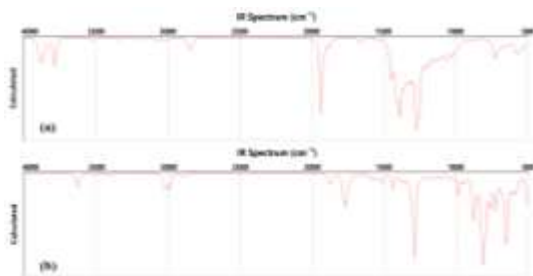


Figura 2. Espectros de FTIR del (a) RB5y (b) hidrogel, respectivamente.

Nota: Elaboración propia.

b) Adsorción del RB5 en el hidrogel.

La Figura 3 muestra que los grupos $-\text{SO}_3\text{Na}$ y $-\text{S}(\text{O})_2-$, no interactúan con la molécula de hidrogel, por lo que su capacidad de adsorción podría ser menor, ya que Filipkowska (2006) reportó que el número de anillos bencénicos y grupos $-\text{SO}_3\text{Na}$ favorecen directamente en la adsorción.

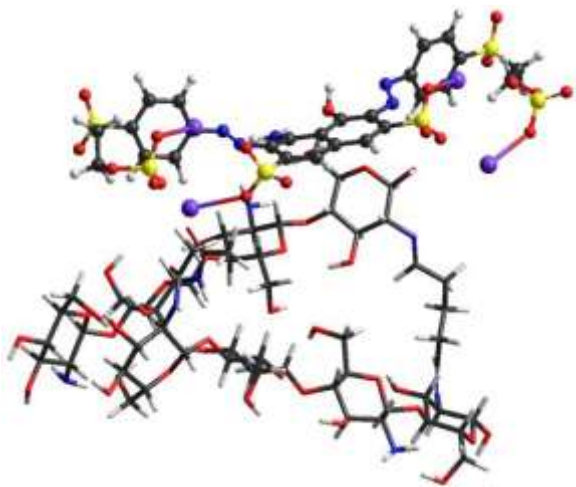


Figura 3. Adsorción del colorante RB5 en el hidrogel Q/G.

Nota: Elaboración propia.

Los valores negativos de ΔG (-779832.74 kcal/mol) y $\Delta H_{\text{form.}}$ (-2487.32 kcal/mol) indicaron que la adsorción del colorante (ver Figura 4) fue

exotérmica y espontánea; además, la adsorción de RB5 es favorablemente con una $\Delta G_{\text{Ads.}}$ de -33.47 kcal/mol (Chen & Huang (2010). De acuerdo con Meretoudi et al. (2025) y Razmi et al. (2019) determinaron que el mecanismo de adsorción de RB5 involucra interacciones electrostáticas entre los grupos $-\text{NH}_4^+$ del adsorbente y los grupos $-\text{SO}_3^-$; sin embargo, los grupos $-\text{NH}_2$ y $-\text{OH}$ de RB5 pueden originar posibles interacciones puentes de hidrógeno; y sus anillos de naftaleno pueden interactuar con los grupos $-\text{OH}$ y/o $\text{C}=\text{O}$ del adsorbente mediante interacciones del tipo $n-\pi$ (Galan et al., 2021; Mallakpour et al., 2022). Además, la distribución electrónica de la adsorción del colorante RB5 en el hidrogel indican que las zonas electrofílicas radican en los enlaces OH y CO, mientras que las zonas nucleofílicas se apreciaron en los enlaces NH y CH.

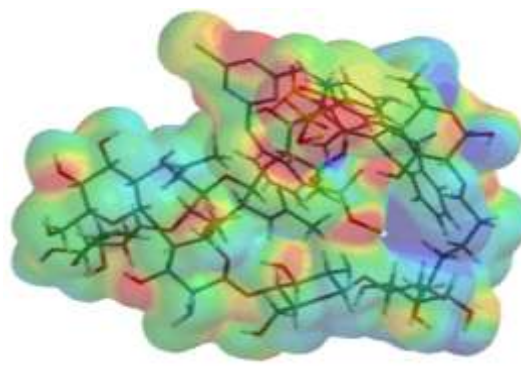


Figura 4. Distribución electrónica de la adsorción del RB5 en el hidrogel.

Nota: Elaboración propia.

El espectro de FTIR de la adsorción se aprecia en la Figura 5 en donde las principales vibraciones observadas de 3888 a 3554 cm^{-1} correspondieron al estiramiento OH, en 1886 y 1765 cm^{-1} fue

observado el estiramiento C=O (Drabczyk et al., 2020), en 1606 cm^{-1} se asignó al estiramiento de la amina primaria (Pasieczna-Patkowska et al., 2025), en 1467 y 1394 cm^{-1} se asignó al estiramiento del enlace CO (Castellar-Ortega et al., 2020), en el rango de 1271 a 1205 cm^{-1} se observaron las vibraciones del enlace NHCO, de 1146 a 1028 cm^{-1} se asignaron a los enlaces C–O–C, C–OH y C–C (Ortega-Sánchez et al., 2024), de 981 a 808 cm^{-1} correspondió al estiramiento de la amina del quitosano y a la deformación del enlace CH (Drabczyk et al., 2020; Ortega-Sánchez et al., 2024).

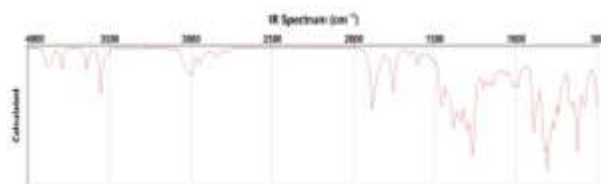


Figura 5. FTIR de la adsorción del RB5 en el hidrogel.

Nota: Elaboración propia.

Conclusiones

El estudio demostró que la adsorción de RB5 fue exotérmica y espontáneamente, con una ΔG_{Ads} de -33.47 Kcal/mol . El mecanismo de adsorción involucró interacciones puente de hidrógeno de los grupos -NH_2 y -OH e interacciones del tipo $n-\pi$ entre los anillos de naftaleno de los colorantes con los grupos -OH y/o C=O del adsorbente. Con los resultados obtenidos, el uso de hidrogeles de quitosano es ampliamente recomendado para la remoción de colorantes RB5 y mejorar así la calidad del agua.

Agradecimientos

Al TecNM por el financiamiento del proyecto 21770.25-P: Análisis experimental y computacional de la adsorción monocomponente y binaria de colorantes reactivos textiles negro (5 y 8) y azul (4 y 5) mediante perlas de hidrogel de quitosano aprobado en la Convocatoria Proyectos de Investigación Científica, Desarrollo Tecnológico e Innovación 2025.

Referencias

- Akakuru, O., Isiuku, B. O. (2017). Chitosan hydrogels and their glutaraldehyde-crosslinked counterparts as potential drug release and tissue engineering systems - synthesis, characterization, swelling kinetics and mechanism. *Journal of Physical Chemistry & Biophysics*, 07(03).
<https://doi.org/10.4172/2161-0398.1000256>
- Al-Tohamy, R., Sun, J., Fareed, M. F., Kenawy, E. R., Ali, S. S. (2020). Ecofriendly biodegradation of Reactive Black 5 by newly isolated *Sterigmatomyces halophilus* SSA1575, valued for textile azo dye wastewater processing and detoxification. *Sci Rep* 10, 12370 (2020).
<https://doi.org/10.1038/s41598-020-69304-4>
- Aramesh, N., Bagheri, A. R., & Bilal, M. (2021). Chitosan-based hybrid materials for adsorptive removal of dyes and underlying interaction mechanisms. *International Journal of Biological Macromolecules*, 183, 399–422.
<https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2021.04.158>
- Bateni, A., Salahshoori, I., Namayandeh Jorabchi, M., Moayed Mohseni, M., Raji Asadabadi, M., & Khonakdar, H. A. (2025). Molecular simulation-based assessing of a novel metal-organic framework modified with alginate and chitosan biopolymers for anionic reactive black 5 and cationic crystal violet pollutants capture. *Separation and Purification Technology*,

354, 128986.

<https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.128986>

Cavalcante, L. C., de Carvalho, C. K., Bassetti, F. J., Coral, L. A. A. (2024). Kinetic, isothermal and thermodynamic studies of Reactive Black 5 removal using rice husk ashes and powdered activated carbon, *Desalination and Water Treatment*, Volume 320, e100606. <https://doi.org/10.1016/j.dwt.2024.100606>

Castellar-Ortega, G. C., Cely-Bautista, M. M., Cardozo-Arrieta, B. M., Angulo-Mercado, E. R., Mendoza-Colina, E. J., Zambrano-Arevalo, A. M., Jaramillo-Colpas, J. E., Rosales-Díaz, C. L. (2020). Removal of the direct navy-blue dye on modified coffee bean. *Tecnología y Ciencias del Agua*, 11(4), 1-26. <https://doi.org/10.24850/j-tyca-2020-04-01>

Chen, A.-H., & Huang, Y.-Y. (2010). Adsorption of Remazol Black 5 from aqueous solution by the templated crosslinked-chitosans. *Journal of Hazardous Materials*, 177(1–3), 668–675. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2009.12.083>

Cortazar-Martínez, A., Coronel-Olivares, C., Escalante-Lozada, A., González-Ramírez, C. (2014). Contaminación generada por colorantes de la industria textil. *Vida Científica*, 2(3). <https://www.uaeh.edu.mx/scige/boletin/prepa4/n3/e1.html>

Drabczyk, A., Kudłacik-Kramarczyk, S., Głąb, M., Kędzierska, M., Jaromin, A., Mierzwiński, D., Tyliszczak, B. (2020). Physicochemical investigations of chitosan-based hydrogels containing *Aloe Vera* designed for biomedical use. *Materials (Basel)*, 13(14), e3073. <https://doi.org/10.3390/ma13143073>

El Nemr, A., Moneer, A. A., Khaled, A., El Sikaily, A., & El-Said, G. F. (2014). Modeling of synergistic halide additives' effect on the corrosion of aluminum in basic solution containing dye. *Materials Chemistry and Physics*, 144(1–2), 139–154. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2013.12.034>

Filipkowska, U. (2006). Adsorption and Desorption of Reactive Dyes onto Chitin and Chitosan Flakes and Beads. *Adsorption Science & Technology*, 24(9), 781–795. <https://doi.org/10.1260/026361706781388932>

Flores López, S. L., Moreno Virgen, M. R., Hernández Montoya, V., Montes Morán, M. A., Tovar Gómez, R., Rangel Vázquez, N. A., Pérez Cruz, M. A., & Esparza González, M. S. (2018). Effect of an external magnetic field applied in batch adsorption systems: Removal of dyes and heavy metals in binary solutions. *Journal of Molecular Liquids*, 269, 450–460. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.08.063>

Galan, J., Trilleras, J., Zapata, P. A., Arana, V. A., & Grande-Tovar, C. D. (2021). Optimization of Chitosan Glutaraldehyde-Crosslinked Beads for Reactive Blue 4 Anionic Dye Removal Using a Surface Response Methodology. *Life*, 11(2), Article 2. <https://doi.org/10.3390/life11020085>

Gallego, C., Rubio-Clemente, A. (2022). Remoción de colorantes en aguas procedentes de la industria textil mediante el uso de biocarbón. *AFINIDAD LXXIX*. 79(596), 98-107. <https://raco.cat/index.php/afinidad/article/view/401287>

Hira, N. e, Lock, S. S. M., Shoparwe, N. F., Lock, I. S. M., Lim, L. G., Yiin, C. L., Chan, Y. H., & Hassam, M. (2023). Review of Adsorption Studies for Contaminant Removal from Wastewater Using Molecular Simulation. *Sustainability*, 15(2), Article 2. <https://doi.org/10.3390/su15021510>

Kim, H. J., Kim, S., Hwang, J.H., Lee, Y., Shin, Y., Choi, S., Oh, J., Koh, J., Lee, S. H., Choi, Y. K., Bhatia, S. K., Yang. (2024). Biodegradation of azo dye reactive black 5 by strict anaerobe *Clostridium acetobutylicum* and evaluation of its effects for hydrogen production. *Biotechnol Bioproc E* 29, 1118–1130 (2024). <https://doi.org/10.1007/s12257-024-00131-4>

- Li, B., Shan, C.-L., Zhou, Q., Fang, Y., Wang, Y.-L., Xu, F., Han, L.-R., Ibrahim, M., Guo, L.-B., Xie, G.-L., & Sun, G.-C. (2013). Synthesis, characterization, and antibacterial activity of cross-linked chitosan-glutaraldehyde. *Marine Drugs*, 11(5), 1534-1552. <https://doi.org/10.3390/md11051534>
- Mallakpour, S., Radfar, Z., & Feiz, M. (2022). Optimization of chitosan/tannic acid@ ZnFe layered double hydroxide bionanocomposite film for removal of reactive blue 4 using a response surface methodology. *International Journal of Biological Macromolecules*, 209, 747-762. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2022.04.020>
- Melgoza-Alemán, R. M., Buitrón, G. (2005). Biodegradación del colorante azo azul disperso 79 en un reactor discontinuo secuencial bajo ambientes anaerobios/aerobios. *Revista CENIC Ciencias Biológicas*, 36, 1-7. <https://www.redalyc.org/pdf/1812/181220525100.pdf>
- Meretoudi, A. D., Kalampogias, I., Koumentakou, I., Kalavrouziotis, I. K., Tolkou, A. K., & Kyzas, G. Z. (2025). Chitosan/Montmorillonite/Graphene Oxide Composites for the Adsorption of Dyes from Single-Component Solutions, Binary Mixtures, and Real Textile Wastewaters: On Understanding the Adsorption Interactions. *Langmuir*, 41(34), 23198-23213. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5c03148>
- Mishra, A., Omoyeni, T., Singh, P. K., Anandakumar, S., Tiwari, A. (2024). Trends in sustainable chitosan-based hydrogel technology for circular biomedical engineering: A review. *International Journal of Biological Macromolecules*, 276(1), 133823. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2024.133823>
- Ortega-Sánchez, C., Melgarejo-Ramírez, Y., Rodríguez-Rodríguez, R., Jiménez-Ávalos, J. A., Giraldo-Gomez, D. M., Gutiérrez-Gómez, C., Rodríguez-Campos, J., Luna-Bárceñas, G., Velasquillo, C., Martínez-López, V., & García-Carvajal, Z. Y. (2024). Hydrogel Based on Chitosan/Gelatin/Poly(Vinyl Alcohol) for In Vitro Human Auricular Chondrocyte Culture. *Polymers*, 16(4), 479. <https://doi.org/10.3390/polym16040479>
- Pratt, D. Y., Wilson, L. D., & Kozinski, J. A. (2013). Preparation and sorption studies of glutaraldehyde cross-linked chitosan copolymers. *Journal of Colloid and Interface Science*, 395, 205-211. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2012.12.044>
- Razmi, F. A., Ngadi, N., Wong, S., Inuwa, I. M., & Opotu, L. A. (2019). Kinetics, thermodynamics, isotherm and regeneration analysis of chitosan modified pandan adsorbent. *Journal of Cleaner Production*, 231, 98-109. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2019.05.228>
- Saroyan, H., Ntagiou, D., Rekos, K., & Deliyanni, E. (2019). Reactive Black 5 Degradation on Manganese Oxides Supported on Sodium Hydroxide Modified Graphene Oxide. *Applied Sciences*, 9(10), 2167. <https://doi.org/10.3390/app9102167>
- Sarvestani, M. R. J., & Doroudi, Z. (2020). Removal of reactive black 5 from waste waters by adsorption: A comprehensive review. *Journal of Water and Environmental Nanotechnology*, 5(2), 180-190. <https://doi.org/10.22090/jwent.2020.02.008>
- Thirupathi, K., Raorane, C. J., Ramkumar, V., Ulagesan, S., Santhamoorthy, M., Raj, V., Krishnakumar, G. S., Phan, T. T. V., & Kim, S.-C. (2023). Update on Chitosan-Based Hydrogels: Preparation, Characterization, and Its Antimicrobial and Antibiofilm Applications. *Gels*, 9(1), 35. <https://doi.org/10.3390/gels9010035>
- Yuen, C. W. M., Ku, S. K. A., Choi, P. S. R., Kan, C. W., & Tsang, S. Y. (2005). Determining functional groups of commercially available ink-jet printing reactive dyes using infrared spectroscopy, *Research Journal of Textile and*

Apparel, 9(2), 26–38.

<https://doi.org/10.1108/RJTA-09-02-2005-B004>

Zaruma-Arias, P. E., Proal-Nájera, J. B., Chaires-Hernández, I., Salas-Ayala, H. I. (2018). Textile industrial dyes and optimal wastewater effluents treatments: A short review. *Revista de la Facultad de Ciencias Químicas*, 19, 38-47.

<https://publicaciones.ucuenca.edu.ec/ojs/index.php/quimica/article/view/2216>