

## Adsorción de Verde Malaquita Utilizando Magnetita: Estudio Cinético y Termodinámico

### Adsorption of Malachite Green Using Magnetite: Kinetic and Thermodynamic Study

D. de la Peña Aguirre <sup>a</sup>, E. M. Múzquiz Ramos <sup>a</sup>, J. C. Ríos Hurtado <sup>b</sup>, J. A. Claudio Rizo <sup>a</sup>, M. Gallardo Heredia <sup>a</sup>, L. F. Cano Salazar <sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Ing. J. Cárdenas Valdez S/N, República, 25280 Saltillo, Coahuila, México

<sup>b</sup> Facultad de Metalurgia, Universidad Autónoma de Coahuila, Carretera 57, Km 5, Monclova, 25710, Monclova, Coahuila, México

**Resumen** El deterioro ambiental por la industrialización y el uso de sustancias químicas ha provocado una grave contaminación del agua, destacando metales pesados, nitratos, microplásticos, residuos industriales y colorantes como los principales contaminantes. La industria textil, por su alto consumo de colorantes, contribuye significativamente a este problema, afectando ecosistemas y salud humana. Entre las tecnologías para mitigar esta situación, la adsorción destaca por su eficiencia y bajo costo. En este contexto, la magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), una ferrita con propiedades magnéticas ha mostrado gran potencial como adsorbente. Este trabajo evalúa su capacidad para remover el colorante verde malaquita. A pH neutro, se logró una remoción del 66% (53 ppm) usando 10 mg de magnetita. La cinética se ajustó al modelo de pseudo segundo orden, y las isotermas al modelo de Langmuir, con una capacidad máxima de adsorción de 2 mg/g. Los parámetros termodinámicos obtenidos fueron:  $^\circ\Delta H = 119 \text{ kJ/mol}$ ,  $^\circ\Delta S = 21 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$  y  $^\circ\Delta G = -16 \text{ kJ/mol}$ .

#### Palabras Clave:

Verde Malaquita, Magnetita, Adsorción, Cinética, Termodinámica

**Abstract** Environmental degradation driven by industrialization and extensive chemical usage has led to severe water pollution, with heavy metals, nitrates, microplastics, industrial effluents, and dyes being the primary contaminants. The textile industry, due to its intensive dye consumption, is a major contributor, posing risks to both ecosystems and human health. Among remediation strategies, adsorption offers notable advantages, including cost-effectiveness and efficiency. Magnetite ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), a ferrite with magnetic properties, has emerged as a promising adsorbent. This study investigates its performance in removing malachite green dye from aqueous solution. At neutral pH, 10 mg of magnetite achieved a 66% removal efficiency (equivalent to 53 ppm). Adsorption kinetics followed a pseudo-second-order model, while equilibrium data fitted the Langmuir isotherm, with a maximum adsorption capacity of 2 mg/g. Thermodynamic parameters indicated a spontaneous and endothermic process, with  $\Delta H = 119 \text{ kJ/mol}$ ,  $\Delta S = 21 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$ , and  $\Delta G = -16 \text{ kJ/mol}$ . These results highlight magnetite's potential for application in dye-contaminated wastewater treatment.

#### Keywords:

Malachite Green, Magnetite, Adsorption, Kinetic, Thermodynamic

## 1. Introducción

El medio ambiente ha experimentado un progresivo deterioro como consecuencia del crecimiento industrial, el desarrollo tecnológico y las actividades domésticas. En particular, la contaminación del agua representa actualmente uno de los principales desafíos ambientales, debido al uso intensivo de sustancias químicas en diversas industrias.

Una amplia variedad de contaminantes afecta a los cuerpos de agua. Entre los más relevantes se encuentran los metales pesados, como el plomo y el arsénico, altamente tóxicos para los organismos acuáticos y los seres humanos; los nitratos, que promueven la eutrofización y el crecimiento descontrolado de algas; los micro plásticos, que impactan negativamente la fauna

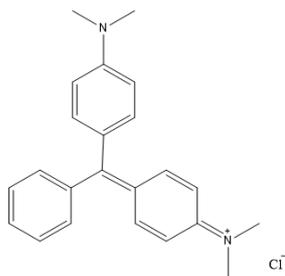
marina y se incorporan a la cadena alimentaria; los residuos industriales; y los colorantes sintéticos, los cuales disminuyen la transparencia y calidad del agua, comprometiendo la integridad del ecosistema acuático (Andrade-Guel et al., 2023).

Aunque existen diversas clasificaciones para los colorantes, los que son de naturaleza sintética, catiónica y aromática, hacen que sean más estables en el medio y difíciles de biodegradar (Muinde et al., 2017), uno de ellos es el verde malaquita (VM); que es un colorante básico soluble en agua perteneciente a la familia del trifenilmetano y que se emplea ampliamente en alimentación, salud, textil y otros sectores, incluso como parasiticida en acuicultura (Qu et al., 2019). La Figura 1 muestra la estructura química del colorante verde malaquita o Cloruro de N-(4 - {[4-

\*Autor para la correspondencia: lucia.cano@uadec.edu.mx

Correo electrónico: daniel.pena@uadec.edu.mx (Daniel de la Peña-Aguirre), emuzquiz@uadec.edu.mx (Elia Martha Múzquiz-Ramos), jorgerios@uadec.edu.mx (Jorge Carlos Ríos-Hurtado), jclaudio@uadec.edu.mx (Jesús Alejandro Claudio-Rizo), marisol.gallardo@uadec.edu.mx (Marisol Gallardo-Heredia), lucia.cano@uadec.edu.mx (Lucía Fabiola Cano-Salazar)

(dimetilamino) fenil] (fenil) metilen ciclohexa-2,5-dien-1-iliden)-N-metilmetanaminio.



**Figura. 1:** Estructura química del verde malaquita (elaboración propia)

A pesar de que tiene una amplia aplicación en diversas industrias, el verde malaquita (VM) tiene propiedades tóxicas que duran mucho tiempo en el agua y es difícil de ser degradado por microorganismos.

Para mitigar estos efectos, se han desarrollado diversas tecnologías de tratamiento de aguas residuales, como la electrocoagulación, la filtración por membranas, los procesos de oxidación avanzada y la adsorción. Esta última se destaca por su bajo costo, facilidad operativa y eficiencia, además de permitir el uso de materiales adsorbentes con propiedades específicas, como alta área superficial y grupos funcionales activos, que pueden ser diseñados para la captura selectiva de ciertos contaminantes (Bayantong et al., 2021).

Existen diferentes materiales que se pueden utilizar para la eliminación de contaminantes como los son las arcillas, polímeros, estructuras metal orgánicas, materiales derivados del carbón y también existen materiales compuestos, algunos de estos son con carbón y diferentes óxidos como lo son las ferritas.

Una ferrita es un material cerámico que está formado por óxido de hierro ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) en gran proporción mezclado con elementos metálicos como el Bario (Ba), manganeso (Mn), níquel (Ni), zinc (Zn) en pequeñas proporciones, la naturaleza tanto del óxido de hierro como del metal es eléctricamente no conductora, ferromagnética y una alta permeabilidad lo cual lo hace un material apto para combinarse con otros aumentar la capacidad de adsorción (Thakur et al., 2020).

En este contexto, las ferritas han demostrado ser adsorbentes eficaces para la remoción de una amplia gama de contaminantes, incluyendo colorantes orgánicos (Thakur et al., 2020); por ejemplo, Macías y colaboradores reportaron el uso de magnetita como adsorbente de arsénico (Macías Erazo Karen Elizabeth, 2022), además, existen múltiples reportes de magnetita para la adsorción de diversos colorantes (Aly et al., 2024).

Por lo tanto, el presente estudio se enfoca en la evaluación de la magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) como material adsorbente para la eliminación del colorante Verde Malaquita (VM) en soluciones modelo. Asimismo, se analizan los parámetros cinéticos y termodinámicos del proceso, con el fin de comprender los mecanismos que gobiernan la adsorción y optimizar su eficiencia.

## 2. Metodología

### 2.1 Síntesis de magnetita

La síntesis de la magnetita se realizó siguiendo el método descrito por Macías y colaboradores en el 2016. Se preparó una disolución acuosa de cloruro férrico ( $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), cloruro ferroso

( $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ) 2:1. Simultáneamente se calentó agua destilada hasta  $70^\circ\text{C}$  y, bajo agitación magnética, se agregó hidróxido de amonio ( $\text{NH}_4\text{OH}$ ) hasta tener una solución 1.6 molar, dejando tiempo suficiente para que la solución se establezca a  $70^\circ\text{C}$ . Luego se añade la solución de cloruros gota a gota a la solución de hidróxido de amonio hasta obtener un precipitado negro, correspondiente a la magnetita, manteniendo la agitación durante 30 min. El precipitado se lavó varias veces con agua destilada para eliminar los cloruros residuales y se secó al aire a temperatura ambiente, para su posterior molienda (Macías-Martínez et al., 2016).

### 2.2 Pruebas de adsorción

Se utilizó una masa de 10 mg de magnetita, durante un tiempo de contacto de una hora, a temperatura ambiente y con agitación constante. La concentración inicial de la mezcla fueron 20, 40, 60, 80 y 100 ppm utilizando un volumen de 5 mL. Transcurrido el tiempo de contacto se filtraron las muestras y se leyeron en el espectro UV-Vis a la longitud de onda correspondiente del colorante verde malaquita (620nm).

### 2.3 Efecto del tiempo de contacto

Para analizar el comportamiento de la adsorción del colorante VM sobre magnetita a lo largo del tiempo, se llevó a cabo un estudio cinético de adsorción. Se emplearon concentraciones iniciales de 20, 40, 60, 80 y 100 ppm y tiempos de contacto que oscilaron entre 0 y 180 minutos, utilizando una masa específica del adsorbente y 5 mL de las soluciones de VM.

### 2.4 Estudió cinético

Una vez obtenidos resultados de las pruebas de efecto de tiempo de contacto, los datos se utilizaron para probarlos en los modelos cinéticos de Elovich, Pseudo Primer Orden y Pseudo Segundo Orden, las ecuaciones utilizadas para el análisis matemático de los datos obtenidos como se muestra en la Tabla 1.

**Tabla 1:** Ecuaciones de diferentes modelos cinéticos (Sevim et al., 2021)(Musah et al., 2022)

Modelo cinético	Ecuación	Ecuación lineal	Gráfico
Elovich	$q_t = \beta t + \text{Ln}(\beta t + \beta_e + t)$	$q_t - \beta * \text{Ln}(\beta t + \beta) + \beta * \text{Ln}(t)$	$q_e \text{ VS } \text{Ln } t$
Pseudo primer orden	$q_t = q_e [1 - \exp(-k_{1p} * t)]$	$\text{Ln}(q_e - q_t) = \text{Ln}(q_e) - k_{1p} * t$	$\text{Ln}(q_e - q_t) \text{ vs. } t$
Pseudo segundo orden	$q_t = k_{2p} * Q_e^2 * t / (1 + k_{2p} * Q_e * t)$	$t/q_t = (1/k_{2p} * Q_e^2) + (t/Q_e)$	$t/q_t \text{ vs. } t$

Donde:  $q_t$  y  $q_e$  son, respectivamente, la cantidad de colorante adsorbido en el tiempo  $t$  y en el equilibrio ( $\text{mg} \cdot \text{g}^{-1}$ ).  $k_{1p}$ ,  $k_{2p}$  y  $k_p$  son respectivamente el modelo cinético constante de pseudo primer orden ( $\text{min}^{-1}$ ), de pseudo segundo orden ( $\text{g} \cdot \text{mg}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$ ) y difusión intraarticular ( $\text{g} \cdot \text{mg}^{-1} \cdot \text{min}^{-0.5}$ );  $\alpha$  ( $\text{mg} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$ ) y  $\beta$  ( $\text{g} \cdot \text{mg}^{-1}$ ) son las constantes del modelo cinético de Elovich.

### 2.5 Isotermas de adsorción

Para evaluar el comportamiento del sistema en equilibrio, se llevaron a cabo estudios de isotermas a tres temperaturas diferentes: 10, 40 y  $50^\circ\text{C}$ . Se utilizaron concentraciones iniciales de 40 a 100 ppm en intervalos de 20 ppm con 10 mg de magnetita y un volumen de 5 mL.

### 2.6 Parámetros termodinámicos

Una vez obtenidos y graficados los datos es posible determinar los parámetros termodinámicos del proceso utilizando el intercepto y pendiente de la ecuación de la recta, así como la constante de los gases ideales  $R$  ( $8.314 \text{ J/Kmol}$ ).

La energía libre de Gibbs ( $\Delta G^\circ$ ) permite discernir si un proceso es espontáneo o no. Valores negativos de  $\Delta G^\circ$  implican un proceso

espontáneo, mientras que valores positivos significan que es necesario aportar energía al sistema, ya que no es capaz de evolucionar por sí solo.  $\Delta G^\circ$  se calcula a partir de la Ec. 1, obteniéndose la Ec. 2. (Lima et al., 2019).

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - (T * \Delta S^\circ) \quad \text{Ec. 1}$$

$$\Delta G^\circ = -RT \ln K \quad \text{Ec. 2}$$

Despejando  $\ln K$  se obtiene la Ec.3 conocida como Ecuación de Van't Hoff

$$\ln K = \frac{-\Delta H^\circ}{R * T} + \frac{\Delta S^\circ}{R} \quad \text{Ec. 3}$$

Al combinar estas dos ecuaciones resulta un gráfico de  $\ln K$  en el eje de las abscisas y  $T^{-1}$  en el eje de las ordenadas debería ser lineal y el intercepto equivaldría a  $\Delta S^\circ/R$ , mientras que la pendiente sería numéricamente igual a  $\Delta H^\circ/R$ . Por su parte  $K$  es la constante de adsorción obtenida del modelo de adsorción utilizado para ajustar los valores experimentales.

Empleando las suposiciones de Van't Hoff es posible estimar el rango de propiedades termodinámicas, tales como la entalpía, entropía y energía libre de Gibbs de los procesos de adsorción.

### 3. Resultados y discusiones

#### 3.1 Síntesis de magnetita

Con base en trabajos previos realizados por nuestro grupo de investigación, se ha establecido que las nanopartículas de magnetita (MNPs) obtenidas mediante el método de coprecipitación presentan una morfología predominantemente esférica, con tamaños en el intervalo de 8 a 12 nm, determinados a partir de estudios por microscopía electrónica de transmisión (TEM) y difracción de rayos X (XRD). Las micrografías de alta resolución (HRTEM) han confirmado además la presencia de una estructura tipo espinela, con planos cristalográficos bien definidos correspondientes a las orientaciones (440), (311) y (220).

Asimismo, se ha observado que las partículas no presentan superficies completamente lisas, sino que exhiben cierta rugosidad superficial, atribuible a irregularidades en los bordes. Esta característica morfológica podría favorecer las interacciones superficie-solución en aplicaciones como adsorción o funcionalización química (Macías-Martínez et al., 2016).

#### 3.2. Pruebas de adsorción

Las pruebas de adsorción de colorantes desempeñan un papel clave en la investigación científica y en la industria, ya que permiten la eliminación de estos contaminantes en cuerpos de agua y la optimización de procesos industriales. En estos experimentos, factores como la masa del adsorbente, el pH de la solución y el tiempo de contacto influyen directamente en la eficiencia del proceso de adsorción (Teo et al., 2022).

La cantidad de adsorbente es un aspecto crucial para determinar la capacidad máxima de adsorción, el pH de la solución influye en la ionización tanto del adsorbente como del colorante, lo que afecta su interacción y, en consecuencia, la cantidad de colorante retenido. Este efecto es especialmente relevante para colorantes con distintos comportamientos en medios ácidos o básicos (Wang et al., 2023).

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos en las pruebas de adsorción del colorante verde malaquita (VM) empleando magnetita como adsorbente. Con el objetivo de

establecer una base comparativa con un estudio previo del mismo proyecto de investigación, en el cual se evaluó el desempeño de nanoplaquetas de grafeno (de la Peña-Aguirre et al., 2025), se emplearon condiciones experimentales equivalentes. En particular, se fijó la masa del adsorbente en 10 mg y el pH de la solución en 7, a fin de mantener la coherencia metodológica. Asimismo, se evaluó el efecto del tiempo de contacto y de la temperatura sobre la eficiencia del proceso de adsorción

En esta sección se presentan y analizan los resultados obtenidos en las pruebas de adsorción del colorante verde malaquita (VM) empleando magnetita como adsorbente. Con el objetivo de establecer una base comparativa con un estudio previo del mismo proyecto de investigación, en el cual se evaluó el desempeño de nanoplaquetas de grafeno (de la Peña-Aguirre et al., 2025), se emplearon condiciones experimentales equivalentes. En particular, se fijó la masa del adsorbente en 10 mg y el pH de la solución en 7, a fin de mantener la coherencia metodológica. Asimismo, se evaluó el efecto del tiempo de contacto y de la temperatura sobre la eficiencia del proceso de adsorción.

#### 3.3 Efecto del tiempo de contacto

Para determinar el tiempo óptimo de contacto, se llevó a cabo un estudio de cinética de adsorción utilizando una concentración inicial de 40 a 100 ppm en intervalos de 20 ppm de VM, con tiempos de 0 a 180 minutos, a temperatura ambiente y bajo agitación de 250 rpm. El porcentaje de adsorción de un 66% (53 ppm) de remoción a los 180 min sin alcanzar el equilibrio por lo cual debe extenderse la cinética hasta que alcance el equilibrio en la Figura 2 se muestra la capacidad de adsorción con una concentración de 80 ppm con respecto del tiempo.

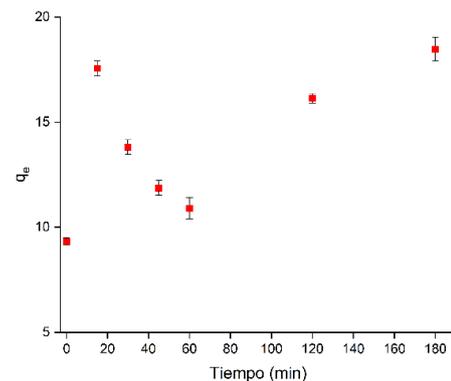


Figura. 2: Efecto de tiempo de contacto

#### 3.4 Modelos cinéticos

Los datos obtenidos del análisis cinético se ajustaron a los modelos de Elovich, Pseudo Primer Orden y Pseudo Segundo Orden, según las ecuaciones presentadas en la Tabla 1. Estos modelos permiten determinar si el proceso de adsorción ocurre por quimisorción o fisorción. De los tres modelos evaluados, el de Pseudo Segundo Orden fue el que mejor se ajustó a los datos experimentales, lo que indica que la adsorción depende del número de sitios desocupados en la superficie del material adsorbente (Zheng et al., 2024). Para comprender mejor el comportamiento de la adsorción de VM en magnetita. En la Tabla 2 se muestran los  $R^2$  de los modelos cinéticos usados.

Tabla 2:  $R^2$  de los diferentes modelos cinéticos

Modelo cinético usado	$R^2$
Pseudo primer orden	0.0202
Pseudo segundo orden	0.9948
Elovich	0.8851

En la Figura 3 se graficaron los datos obtenidos de la capacidad de adsorción de la magnetita.

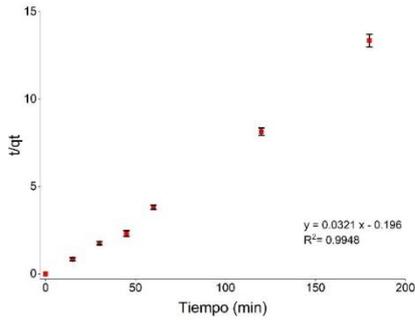


Figura. 3: Modelo cinético de pseudo segundo orden

### 3.5 Isotermas de adsorción

Las isotermas de adsorción describen la relación entre la cantidad de soluto adsorbida en equilibrio y su concentración en la fase líquida, a temperatura constante. Por ello, se realizaron estudios isotérmicos a 10, 40 y 50 °C con el fin de evaluar el efecto de la temperatura sobre el proceso de adsorción. Las pruebas se llevaron a cabo utilizando concentraciones iniciales de colorante en un rango de 0 a 100 ppm, con incrementos de 20 ppm, empleando 10 mg de magnetita y 5 mL de solución en cada ensayo.

Tras un tiempo de contacto de 24 horas, se cuantificó la concentración de colorante remanente en solución. Con estos datos se ajustaron diferentes modelos isotérmicos, como Freundlich, Temkin y Langmuir, siendo este último el que mostró el mejor ajuste. A partir de dicho modelo se determinó la capacidad máxima de adsorción ( $q_{max}$ ) de los sistemas. En la Figura 4, se presentan las capacidades de adsorción del colorante con magnetita ( $q_e$ ), donde se puede apreciar que este parámetro incrementa al aumentar la concentración inicial del analito. La Tabla 3 presenta los valores de  $R^2$  obtenidos para cada modelo, y en las Figuras 4, 5 y 6 se muestran los gráficos del modelo de Langmuir a las diferentes temperaturas evaluadas.

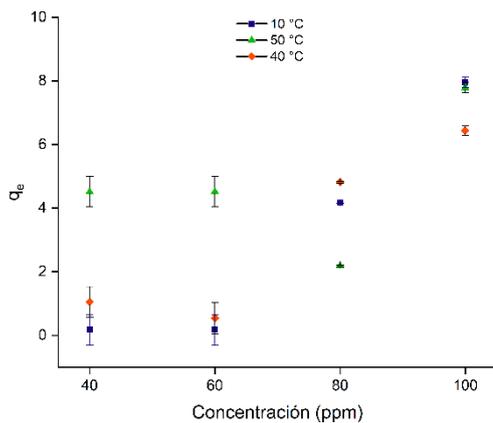


Figura. 4: Capacidades de adsorción de VM con magnetita

Tabla 3: Valores de  $R^2$  de los distintos modelos isotérmicos

Modelo isotérmico usado	$R^2$
Freundlich	0.9196
Tempkin	0.9332
Langmuir	0.9999

En la Tabla 4 se presentan los valores máximos de capacidad de adsorción obtenidos para cada temperatura evaluada. Se observa que la mayor eficiencia del proceso se alcanza a 40 °C, con una capacidad de adsorción cercana a 2 mg/g, lo que indica que a esta temperatura el proceso se ve favorecido.

Tabla 4: Valores de capacidad de adsorción a diferentes temperaturas empleando el modelo de Langmuir

Temperatura (°C)	$Q_{max}$ (mg/g)
10	1.99
40	2.01
50	1.94

Como se observa en los resultados experimentales, los valores de  $q_e$  son superiores a los de  $q_{max}$  predichos por el modelo de Langmuir. Esta desviación puede atribuirse a un comportamiento de adsorción no ideal, en el cual el proceso podría involucrar mecanismos que van más allá de los considerados en el modelo teórico, tales como la adsorción en múltiples capas, interacciones químicas específicas o fenómenos de llenado de poros. Asimismo, a concentraciones iniciales elevadas del adsorbato, la capacidad de adsorción puede superar la predicción teórica debido a la activación de sitios adicionales de adsorción o a la presencia de interacciones intermoleculares que el modelo no contempla (Murphy et al., 2023).

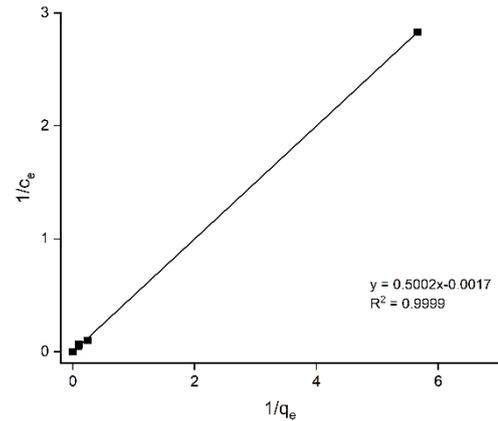


Figura. 5: Modelo de isoterma de Langmuir a 10°C

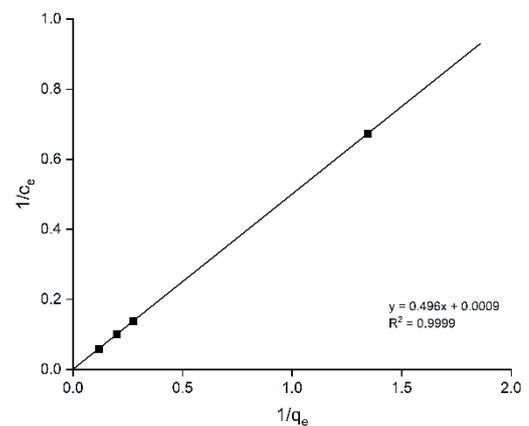


Figura. 6: Modelo de isoterma de Langmuir a 40°C

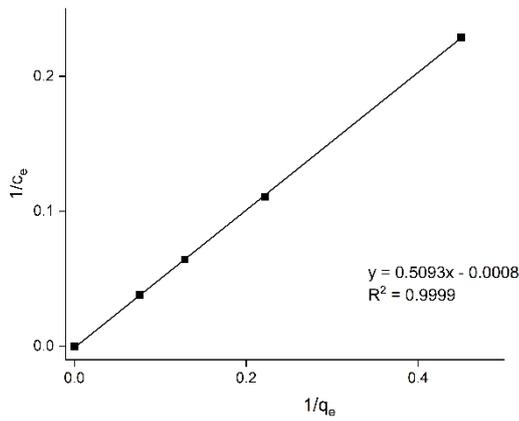


Figura 7: Modelo de isoterma de Langmuir a 50°C

Dado que los datos experimentales se ajustaron al modelo de Langmuir, es posible calcular el parámetro  $K_R$  utilizando la constante de Langmuir (también obtenida experimentalmente) y la concentración del analito, como se muestra en la Ecuación 4.

$$K_R = \frac{1}{1 + K_L C_0} \quad \text{Ec. 4}$$

Donde  $K_R$  es un factor de separación adimensional,  $C_0$  es la concentración inicial (mg/L), y  $K_L$  es la constante de Langmuir obtenida de la linealización de los datos experimentales, en (L/g). El parámetro  $K_R$  indica la forma de la isoterma de acuerdo con su valor como se muestra en la Tabla 5 y 6 (Al-Ghouti & Da'ana, 2020).

Este parámetro permite evaluar si el proceso de adsorción es favorable. En la Tabla 6 se presentan los valores calculados de  $K_R$ , y se observa que todos se encuentran en el rango  $0 < K_R < 1$ , lo cual indica que la adsorción es favorable bajo las condiciones empleadas. Además, dado que los valores de  $K_R$  son cercanos a cero, se puede inferir que el proceso tiende a ser irreversible, lo que sugiere una adsorción de naturaleza química (Musah et al., 2022).

Tabla 5: Tipos de isoterma según  $K_R$

Valor de $K_R$	Tipo de isoterma
$K_R > 1$	No favorable
$K_R = 1$	Linear
$K_R = 0$	Irreversible
$0 < K_R < 1$	Favorable

Tabla 6: Valores de  $K_R$

Co (ppm)	$K_R$ (L/g)		
	10 °C	40 °C	50 °C
20	0.0039	0.0017	0.0015
40	0.0036	0.0016	0.0014
60	0.0033	0.0016	0.0014
80	0.0031	0.0015	0.0014
100	0.0039	0.0015	0.0015

### 3.5 Parámetros termodinámicos

La entalpía estándar de adsorción ( $\Delta H^\circ$ ) proporciona información fundamental sobre la naturaleza térmica del proceso de adsorción, indicando si este ocurre de manera exotérmica o endotérmica.

Además, el análisis de  $\Delta H^\circ$  permite estimar la energía de activación involucrada en el proceso, lo cual es clave para comprender su cinética y mecanismos subyacentes. Este parámetro también resulta crucial para distinguir el tipo de adsorción que se lleva a cabo: cuando los valores de  $\Delta H^\circ$  se encuentran en el rango de aproximadamente -40 a -120 kJ/mol, se asocia típicamente con un proceso de adsorción química (quimisorción), caracterizado por la formación de enlaces más fuertes y específicos entre el adsorbato y la superficie del adsorbente. De este modo, el estudio de la entalpía de adsorción no solo ofrece un entendimiento energético, sino que también permite inferir la naturaleza de las interacciones moleculares en el sistema (Cano Salazar et al., 2020).

La entropía estándar de adsorción ( $\Delta S^\circ$ ) proporciona información valiosa acerca de los cambios que ocurren en la superficie del adsorbente durante el proceso de adsorción. Cuando estos cambios son profundos y afectan significativamente la estructura o el orden de la superficie, se observa una disminución en la reversibilidad del proceso, lo que se refleja en un valor negativo de  $\Delta S^\circ$ . Por el contrario, un valor positivo o cercano a cero de la entropía de adsorción sugiere que las modificaciones en la superficie son menos drásticas, favoreciendo así una alta probabilidad de reversibilidad del fenómeno. De esta manera, el análisis de  $\Delta S^\circ$  permite no solo evaluar el grado de alteración superficial, sino también inferir la facilidad con la que el sistema podría retornar a su estado original tras la desorción (He et al., 2018).

Empleando las suposiciones de Van't Hoff es posible estimar el rango de propiedades termodinámicas, tales como la entalpía, entropía y energía libre de Gibbs de los procesos de adsorción, en la Figura 8 se muestra el gráfico de Van't Hoff.

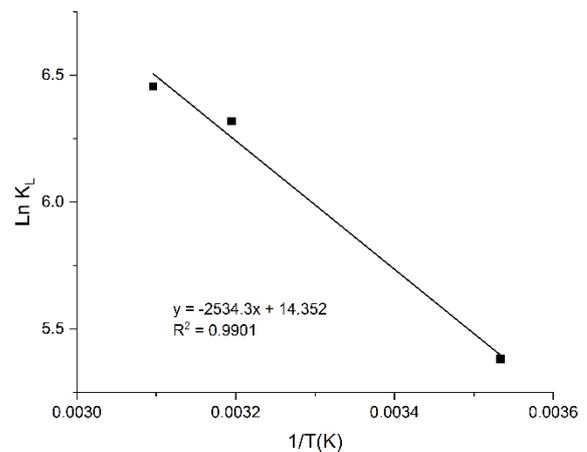


Figura. 8: Modelo de la ecuación de Van't Hoff para la adsorción de VM usando 10 mg de magnetita

A partir de los valores de la pendiente y el intercepto obtenidos del gráfico, y considerando la constante de los gases ideales  $R$  (8.314 J/mol·K), se calcularon los parámetros termodinámicos estándar  $\Delta H^\circ$  y  $\Delta S^\circ$  de adsorción. Posteriormente, con estos valores se determinó la energía libre de Gibbs estándar  $\Delta G^\circ$ . Los resultados, presentados en la Tabla 7, indican que el proceso de adsorción es endotérmico y ocurre con un aumento en el grado de orden del sistema. Además, los valores negativos de  $\Delta G^\circ$  confirman que el fenómeno es espontáneo bajo las condiciones evaluadas.

**Tabla 7:** Parámetros termodinámicos

Temperatura (°C)	$\Delta H^\circ$ (kJ/mol)	$\Delta S^\circ$ (J/mol-K)	$\Delta G^\circ$ (KJ/mol)
10			-12.7
40	119.3	21	-16.4
50			-17.3

A partir de los resultados obtenidos en los estudios cinéticos y termodinámicos realizados en este trabajo, es posible comenzar a proponer el tipo de fuerzas que podrían estar involucradas en el mecanismo de adsorción. Estos resultados permiten inferir si el proceso es de naturaleza física o química, así como la posible participación de interacciones específicas entre el adsorbente y el adsorbato. La interpretación de estas interacciones debe considerar tanto las propiedades superficiales de los materiales como las condiciones experimentales aplicadas.

El punto de carga cero de la magnetita sintetizada por el método de coprecipitación ha sido reportado en un valor cercano a 7.4 (Rajput et al., 2016) ; por lo tanto, al pH utilizado en los experimentos de este trabajo, la magnetita se encontraría ligeramente cargada de manera positiva. Por su parte, el colorante verde malaquita (VM), al ser de naturaleza catiónica, también presenta carga positiva en solución (Ahmed et al., 2022). Dado que ambos materiales poseen carga superficial positiva bajo estas condiciones, las interacciones electrostáticas pueden descartarse como el principal mecanismo de interacción, e incluso podría esperarse una repulsión entre ambas especies.

No obstante, considerando que los análisis cinéticos y termodinámicos sugieren un proceso de naturaleza química, es posible que la adsorción esté favorecida por otros tipos de interacciones, tales como interacciones  $\pi-\pi$  (apilamiento  $\pi-\pi$ ), puentes de hidrógeno, fuerzas de Van der Waals, atrapamiento en poros o captura mecánica, y/o complejación o coordinación superficial (Ahmad et al., 2023a).

En la Tabla 8 se muestra una comparación entre diferentes materiales adsorbentes de magnetita, como se puede observar los materiales compuestos de magnetita o magnetita funcionalizada tienen una mayor capacidad de adsorción en comparación a la magnetita pura y sin modificar utilizada en el presente trabajo de investigación. Sin embargo, aunque la capacidad máxima, de adsorción obtenida en este trabajo es menor a lo reportado en la literatura se debe recalcar que su carácter magnético la convierte en una opción viable para la recuperación del material del medio.

**Tabla 8:** Comparación con distintos materiales adsorbentes de Verde Malaquita

Material adsorbente	Colorante	Cm, Ci, T, Q <sub>max</sub> *	Referencia
Nanopartículas de Magnetita.	Azul de metileno	0.005, 11, -, 20	(Giri et al., 2011)
Nanocompuestos híbridos de Magnetita/Pectina y Magnetita/Sílice/Pectina	Azul de metileno	0.01, 200, - 26	(Attallah et al., 2016)
Nanocompuesto de Magnetita/Ag	Safranina-O	0.01, 350, 30, 46	(Salem et al., 2022)
Magnetita con Ácido húmico	Verde Malaquita	0.02, 60, -, 169	(Ahmad et al., 2022)
Magnetita funcionalizada superficialmente con Nanopartículas	Cristal violeta	0.03, 20, 25, 14	(Jangra et al., 2023)
Ni-Al/Magnetita	Azul de metileno	0.015, 30, -, 68	(Zahara et al., 2023)
Goma esterulia ferromagnética	Verde Malaquita	0.02, 20, 35, 20	(Tank & Sharma, 2023)
Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> /Ácido húmico	Verde Malaquita	0.02, 50, -, 83	(Ahmad et al., 2023b)

Nanopartículas de magnetita	Azul de Bromotimol	0.01, 100, -, 25	(Velo Facal, 2016)
Nanopartículas de magnetita	Azul de metileno	0.05, 100, -,	(Aly et al., 2024)
Nanopartículas magnéticas de Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	Colorantes azo	0.01, 45, -, 23	(Ali et al., 2024)
Magnetita funcionalizada con Ácido húmico	Verde Malaquita	0.01, 50, -, 69	(Ahmad et al., 2024)
<b>Magnetita</b>	<b>Verde Malaquita</b>	<b>0.01, 80, 25, 2</b>	<b>Este trabajo</b>

Cm: Carga de material (g), Ci: Concentración inicial (ppm), Q<sub>max</sub>: Capacidad máxima de adsorción (mg/g), T: temperatura (°C)

#### 4. Conclusiones

Ante la necesidad de mejorar la calidad del agua y cumplir con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) de la Agenda 2030, se buscan alternativas eficaces para tratar la contaminación hídrica. Los resultados del estudio mostraron que con una masa de 10 mg y pH neutro en el proceso de adsorción se logró una tasa de eliminación del 66% correspondientes a 53 ppm. El análisis cinético indicó que los datos experimentales se ajustan al modelo de pseudo segundo orden, lo que sugiere que el mecanismo de adsorción está dominado por interacciones químicas entre el adsorbato y la superficie del adsorbente. El estudio de isothermas mostró un buen ajuste al modelo de Langmuir, lo cual indica una adsorción en monocapa sobre una superficie homogénea. La capacidad máxima de adsorción obtenida fue de 2 mg/g, lo que evidencia el potencial del material para remover verde malaquita en condiciones controladas.

Por su parte, el análisis termodinámico reveló que el proceso es endotérmico, ordenado y no espontáneo. Según diversos autores la funcionalización o incorporación a un material compuesto aumentan las capacidades de adsorción, que es lo que se buscará en un futuro.

#### Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad Autónoma de Coahuila por el apoyo financiero otorgado a través del proyecto DIP-UADEC C01-2024-9. Daniel de la Peña Aguirre agradece a la SECIHTI por la beca otorgada para sus estudios de posgrado.

#### Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses.

#### Referencias

Ahmad, N., Arsyad, F. S., Royani, I., & Lesbani, A. (2022). Selectivity of Malachite Green on Cationic Dye Mixtures Toward Adsorption on Magnetite Humic Acid. *Environment and Natural Resources Journal*, 20(6), 634–643. <https://doi.org/10.32526/enrj/20/202200142>

Ahmad, N., Wijaya, A., Arsyad, F. S., Royani, I., & Lesbani, A. (2024). Layered double hydroxide-functionalized humic acid and magnetite by hydrothermal synthesis for optimized adsorption of malachite green. *Kuwait Journal of Science*, 51(2). <https://doi.org/10.1016/j.kjs.2024.100206>

Ahmad, N., Zahara, Z. A., Wijaya, A., Arsyad, F. S., Royani, I., & Lesbani, A. (2023a). Fabrication and Characterization Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/Humic Acid for the Efficient Removal of Malachite Green. *Science and Technology Indonesia*, 8(4), 616–625. <https://doi.org/10.26554/sti.2023.8.4.616-625>

- Ahmad, N., Zahara, Z. A., Wijaya, A., Arsyad, F. S., Royani, I., & Lesbani, A. (2023b). Fabrication and Characterization Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/Humic Acid for the Efficient Removal of Malachite Green. *Science and Technology Indonesia*, 8(4), 616–625. <https://doi.org/10.26554/sti.2023.8.4.616-625>
- Ahmed, S. B., Mahmoud, N. M. R., Manda, A. A., & Refaat, H. M. (2022). Study of the optimization and mechanism for the remediation process of Malachite green dye via hybrid-based Magnetite-date's stones. *Alexandria Engineering Journal*, 61(12), 9879–9889. <https://doi.org/10.1016/j.aej.2022.02.065>
- Al-Ghouti, M. A., & Da'ana, D. A. (2020). Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: A review. In *Journal of Hazardous Materials* (Vol. 393). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.122383>
- Ali, N. S., Khader, E. H., khudhur, R. H., Abdulrahman, M. A., Salih, I. K., & Albayati, T. M. (2024). Removal of anionic azo dye from wastewater using Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> magnetic nanoparticles adsorbents in a batch system. *Desalination and Water Treatment*, 317. <https://doi.org/10.1016/j.dwt.2024.100033>
- Aly, S. T., Saed, A., Mahmoud, A., Badr, M., Garas, S. S., Yahya, S., & Hamad, K. H. (2024). Preparation of magnetite nanoparticles and their application in the removal of methylene blue dye from wastewater. *Scientific Reports*, 14(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-024-69790-w>
- Andrade-Guel, M. L., Cabello-Alvarado, C. J., Cano-Salazar, L. F., Ávila-Orta, C. A., & Cruz-Delgado, V. J. (2023). Recent Developments in Wastewater Treatments. In *Current Status of Fresh Water Microbiology* (pp. 241–263). Springer Nature Singapore. [https://doi.org/10.1007/978-981-99-5018-8\\_10](https://doi.org/10.1007/978-981-99-5018-8_10)
- Attallah, O. A., Al-Ghobashy, M. A., Nebsen, M., & Salem, M. Y. (2016). Removal of cationic and anionic dyes from aqueous solution with magnetite/pectin and magnetite/silica/pectin hybrid nanocomposites: Kinetic, isotherm and mechanism analysis. *RSC Advances*, 6(14), 11461–11480. <https://doi.org/10.1039/c5ra23452b>
- Bayantong, A. R. B., Shih, Y. J., Ong, D. C., Abarca, R. R. M., Dong, C. Di, & de Luna, M. D. G. (2021). Adsorptive removal of dye in wastewater by metal ferrite-enabled graphene oxide nanocomposites. *Chemosphere*, 274. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.129518>
- Cano Salazar, L. F., Martínez Luévanos, A., Claudio-Rizo, J. A., Carrillo-Pedroza, F. R., Montemayor, S. M., & Rangel Méndez, J. R. (2020). Synthesis, structural characterization and Cu(II) adsorption behavior of manganite (MnOOH) nanorods. *RSC Advances*, 10(1), 179–186. <https://doi.org/10.1039/c9ra09652c>
- Giri, S. K., Das, N. N., & Pradhan, G. C. (2011). Synthesis and characterization of magnetite nanoparticles using waste iron ore tailings for adsorptive removal of dyes from aqueous solution. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 389(1–3), 43–49. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2011.08.052>
- He, K., Chen, G., Zeng, G., Chen, A., Huang, Z., Shi, J., Peng, M., Huang, T., & Hu, L. (2018). Enhanced removal performance for methylene blue by kaolin with graphene oxide modification. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 89, 77–85. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2018.04.013>
- Jangra, A., Singh, J., Kumar, J., Rani, K., Kumar, P., Kumar, S., Singh, D., & Kumar, R. (2023). Dye Elimination by Surface-Functionalized Magnetite Nanoparticles: Kinetic and Isotherm Studies. *Biointerface Research in Applied Chemistry*, 13(4). <https://doi.org/10.33263/BRIAC134.325>
- Lima, E. C., Hosseini-Bandegharai, A., Moreno-Piraján, J. C., & Anastopoulos, I. (2019). A critical review of the estimation of the thermodynamic parameters on adsorption equilibria. Wrong use of equilibrium constant in the Van't Hoof equation for calculation of thermodynamic parameters of adsorption. *Journal of Molecular Liquids*, 273, 425–434. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2018.10.048>
- Macías Erazo Karen Elizabeth. (2022). *Aplicación de nanopartículas magnéticas de hierro (magnetita) en la adsorción de arsénico en aguas contaminadas*. Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.
- Macías-Martínez, B. I., Cortés-Hernández, D. A., Zugasti-Cruz, A., Cruz-Ortíz, B. R., & Múzquiz-Ramos, E. M. (2016). Heating ability and hemolysis test of magnetite nanoparticles obtained by a simple co-precipitation method. *Journal of Applied Research and Technology*, 14(4), 239–244. <https://doi.org/10.1016/j.jart.2016.05.007>
- Muinde, V. M., Onyari, J. M., Wamalwa, B., Wabomba, J., & Nthumbi, R. M. (2017). Adsorption of Malachite Green from Aqueous Solutions onto Rice Husks: Kinetic and Equilibrium Studies. *Journal of Environmental Protection*, 08(03), 215–230. <https://doi.org/10.4236/jep.2017.83017>
- Murphy, O. P., Vashishtha, M., Palanisamy, P., & Kumar, K. V. (2023). A Review on the Adsorption Isotherms and Design Calculations for the Optimization of Adsorbent Mass and Contact Time. In *ACS Omega* (Vol. 8, Issue 20, pp. 17407–17430). American Chemical Society. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c08155>
- Musah, M., Azeh, Y., Mathew, J., Umar, M., Abdulhamid, Z., & Muhammad, A. (2022). Adsorption Kinetics and Isotherm Models: A Review. *Caliphate Journal of Science and Technology*, 4(1), 20–26. <https://doi.org/10.4314/cajost.v4i1.3>

- Qu, W., Yuan, T., Yin, G., Xu, S., Zhang, Q., & Su, H. (2019). Effect of properties of activated carbon on malachite green adsorption. *Fuel*, 249, 45–53. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.03.058>
- Rajput, S., Pittman, C. U., & Mohan, D. (2016). Magnetic magnetite (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) nanoparticle synthesis and applications for lead (Pb<sup>2+</sup>) and chromium (Cr<sup>6+</sup>) removal from water. *Journal of Colloid and Interface Science*, 468, 334–346. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2015.12.008>
- Salem, M. A., Salem, I. A., Zaki, H. M., & El-Sawy, A. M. (2022). Elimination of Safranin-O and a binary mixture of Safranin-O and methylene blue from water by adsorption on magnetite/Ag nanocomposite. *Egyptian Journal of Petroleum*, 31(2), 39–49. <https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2022.05.002>
- Sevim, F., Lacin, O., Ediz, E. F., & Demir, F. (2021). Adsorption capacity, isotherm, kinetic, and thermodynamic studies on adsorption behavior of malachite green onto natural red clay. *Environmental Progress and Sustainable Energy*, 40(1). <https://doi.org/10.1002/ep.13471>
- Tank, S. K., & Sharma, N. (2023). Adsorptive removal of malachite green using ferromagnetic sterculia gum – graftpoly(n-isopropylacrylamide-co-acrylamide)/magnetite nanocomposite. *Indian Journal of Chemical Technology*, 30(5), 643–655. <https://doi.org/10.56042/ijct.v30i5.5193>
- Teo, S. H., Ng, C. H., Islam, A., Abdulkareem-Alsultan, G., Joseph, C. G., Janaun, J., Taufiq-Yap, Y. H., Khandaker, S., Islam, G. J., Znad, H., & Awual, M. R. (2022). Sustainable toxic dyes removal with advanced materials for clean water production: A comprehensive review. *Journal of Cleaner Production*, 332. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.130039>
- Thakur, P., Chahar, D., Taneja, S., Bhalla, N., & Thakur, A. (2020). A review on MnZn ferrites: Synthesis, characterization and applications. In *Ceramics International* (Vol. 46, Issue 10, pp. 15740–15763). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.03.287>
- Velo Facal, C. (2016). *Eliminación de colorantes mediante la utilización de nanopartículas*. Departamento de Química Física e Enxeñaría Química I.
- Wang, K., Kou, Y., Wang, K., Liang, S., Guo, C., Wang, W., Lu, Y., & Wang, J. (2023). Comparing the adsorption of methyl orange and malachite green on similar yet distinct polyamide microplastics: Uncovering hydrogen bond interactions. *Chemosphere*, 340. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.139806>
- Zahara, Z. A., Royani, I., Palapa, N. R., Mohadi, R., & Lesbani, A. (2023). Treatment of Methylene Blue Using Ni-Al/Magnetite Biochar Layered Double Hydroxides Composite by Adsorption. *Bulletin of Chemical Reaction Engineering and Catalysis*, 18(4), 659–674. <https://doi.org/10.9767/bcrec.20049>
- Zheng, Z., Wang, S., Yang, F., & Pan, J. (2024). Controlled surface multifunctional groups over halloysite nanotube enabling reinforced lead adsorption in vitro. *Separation and Purification Technology*, 339. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.126632>