



Esterification of Ethanol with Sulfuric Acid: A Kinetic Study

Shammi Theodore and P.S.T. Sai*

Department of Chemical Engineering, Indian Institute of Technology, Madras 600 036, India

Experiments were conducted in a stirred batch reactor under isothermal conditions for obtaining kinetics of the esterification reaction between ethanol and sulfuric acid. Reactive adsorption technique was employed to enhance the conversion. Anhydrous sodium sulfate was used as an adsorbing agent to remove the water formed during the reaction. The variables include the mole ratio of ethanol to sulfuric acid, reaction temperature, purity of the reactants, and the amount of adsorbing agent. The reaction was found to be reversible and second order at low mole ratios, and irreversible and first order at high mole ratios. The kinetic parameters of the rate law were estimated. A possible reaction mechanism was proposed and validated with the experimental data. The effect of the mole ratio of reactants, anhydrous sodium sulfate loading, and purity of the reactants on the yield of ethyl hydrogen sulfate was studied, using full-factorial search and optimized conditions were obtained by the method of steepest ascent. More precise optimum conditions were obtained using the Box-Wilson composite method.

Des expériences ont été menées dans un réacteur agité discontinu dans des conditions isothermes afin d'obtenir la cinétique de la réaction d'estérification entre l'éthanol et l'acide sulfurique. On a eu recours à la technique d'adsorption réactive pour accroître la conversion. Du sulfate de sodium anhydre a servi d'agent adsorbant pour retirer l'eau formée pendant la réaction. Les variables comprennent le rapport molaire éthanol-acide sulfurique, la température de réaction, la pureté des réactifs et la quantité d'agent adsorbant. La réaction s'est avérée réversible et de second ordre à de faibles rapports molaires et irréversible et de premier ordre à des rapports molaires élevés. Les paramètres cinétiques de la réaction de premier ordre et de second ordre ont été estimés. Un mécanisme de réaction possible est proposé et validé avec les données expérimentales. L'effet du rapport molaire des réactifs, de la charge de sulfate de sodium anhydre et de la pureté des réactifs sur le rendement en sulfate d'hydrogène d'éthyle a été étudié par un plan factoriel complet, et des conditions optimisées ont été obtenues par la méthode de la descente la plus rapide. Des conditions optimales plus précises ont été obtenues à l'aide de la méthode composite Box-Wilson.

Keywords: esterification, diethyl sulfate, reactive adsorption.