

ΜΕΛΕΤΗ ΚΙΝΗΤΙΚΗΣ ΤΗΣ ΑΛΚΑΛΙΚΗΣ ΥΔΡΟΛΥΣΗΣ ΤΟΥ ΟΞΙΚΟΥ ΑΙΘΥΛΕΣΤΕΡΑ ΣΕ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΔΙΑΛΕΙΠΟΝΤΟΣ ΕΡΓΟΥ (BATCH) ΠΑΤΡΑ, ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ 2023

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

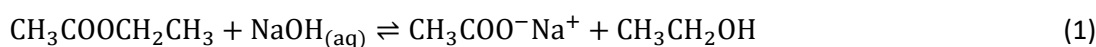
1. Σκοπός
2. Εισαγωγή
3. Θεωρία
4. Πειραματική διάταξη
5. Πειραματική διαδικασία
 - 5.1 Μέρος 1 με βάση δεδομένων: Προσδιορισμός των μοριακών αγωγιμοτήτων
 - 5.2 Πειραματικό Μέρος 2: Εύρεση της τάξης της αντίδρασης ως προς τον οξικό αιθυλεστέρα.
 - 5.3 Πειραματικό Μέρος 3: Εύρεση της τάξης της αντίδρασης ως προς το υδροξείδιο του νατρίου.
 - 5.4 Πειραματικό Μέρος 4: Μεταβολή της κινητικής σταθεράς με τη θερμοκρασία.
 - 5.5 Μέρος 5 με βάση δεδομένων: Υπολογισμός των παραμέτρων α , β , A , E_a από πειραματικά δεδομένα
6. Επεξεργασία αποτελεσμάτων - Ζητούμενα της άσκησης
7. Βιβλιογραφία

Οι σημειώσεις των εργαστηριακών ασκήσεων έχουν διαμορφωθεί σύμφωνα με το Πρόγραμμα Σπουδών του Τμήματος Χημικών Μηχανικών. Η συγγραφή των σημειώσεων έγινε με την συνεργασία των

Χρ. Παρασκευά, Καθηγητής, ΤΧΜ,
Βαρβάρα Συγγούνη, επικουρικό προσωπικό ΤΧΜ και
Κωνσταντίνος Παπαγεωργίου, επικουρικό προσωπικό ΤΧΜ
Susanne Brosda, ΕΔΙΠ, ΤΧΜ

1 Σκοπός

Στη άσκηση θα γίνει η ανάλυση της αλκαλικής υδρόλυσης του οξικού αιθυλεστέρα.



Γενικός σκοπός είναι να μάθετε πως προσεγγίζεται η μελέτη μιας αντίδρασης και παράλληλα να δουλέψετε σε μια αυτοματοποιημένη συσκευή που είναι μικρογραφία ενός πραγματικού αντιδραστήρα. Θα γίνει προσπάθεια εξαγωγής της εξίσωσης του **εγγενή ρυθμού** της αντίδρασης μέσα από μια απλή διερεύνηση της εξάρτησής του από τις συγκεντρώσεις των αντιδρώντων και τη θερμοκρασία.

Η άσκηση χωρίζεται σε πέντε μέρη, δύο εκ των οποίων ερευνώνται πειραματικά, τα μέρη 2 ή 3.

Μέρος 1 με βάση δεδομένων: Προσδιορισμός των μοριακών αγωγιμοτήτων

Στόχος του μέρους 1 είναι ο προσδιορισμός της διαφοράς των μοριακών αγωγιμοτήτων λ_{OH^-} και λ_{OAc^-} η οποία είναι απαραίτητη για την «μετάφραση» της άμεσα μετρούμενης αγωγιμότητας του διαλύματος κ στην συγκέντρωση του παραγόμενου αιθανικού νατρίου, C_A .

Πειραματικό Μέρος 2: Εύρεση της τάξης της αντίδρασης ως προς τον οξικό αιθυλεστέρα.

Στόχος του μέρους 2 είναι ο προσδιορισμός της τάξης του ρυθμού της αντίδρασης ως προς το ένα αντιδρών (EtOAc), χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του αρχικού ρυθμού r_0 .

Πειραματικό Μέρος 3: Εύρεση της τάξης της αντίδρασης ως προς το υδροξείδιο του νατρίου.

Στόχος του μέρους 3 είναι ο προσδιορισμός της τάξης του ρυθμού της αντίδρασης ως προς το ένα αντιδρών (NaOH), χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της αρχικής ταχύτητας r_0 .

Πειραματικό Μέρος 4: Μεταβολή της κινητικής σταθεράς με τη θερμοκρασία.

Στόχος του μέρους 4 είναι ο προσδιορισμός της εξάρτησης της κινητικής σταθεράς της αντίδρασης από τη θερμοκρασία και ο υπολογισμός των παραμέτρων της εξίσωσης Arrhenius.

Μέρος 5 με βάση δεδομένων: Υπολογισμός των παραμέτρων α , β , A , E_A από πειραματικά δεδομένα

Στόχος του μέρους 5 είναι ο υπολογισμός των παραμέτρων της εξίσωσης ρυθμού από τα παραπάνω πειραματικά δεδομένα (μέρη 2-4). Ο υπολογισμός θα γίνει σε ένα βήμα με τη μέθοδο μη γραμμικής παλινδρόμησης (non-linear regression).

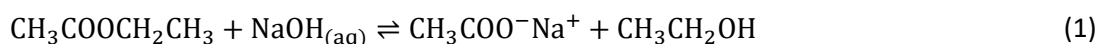
2 Εισαγωγή

Οι **αντιδραστήρες** είναι η βάση των χημικών διεργασιών. Είναι το πιο σημαντικό κομμάτι σε μία χημική βιομηχανία και συνήθως αυτό που απαιτεί τις περισσότερες σχεδιαστικές μελέτες. Δεν υπάρχει συγκεκριμένο μοντέλο για το σχεδιασμό αυτών στην μεγάλη κλίμακα και συνήθως απαιτούνται αρκετά στάδια κλιμάκωσης (scale up).

Για το σχεδιασμό μιας χημικής διεργασίας το πρώτο στάδιο είναι η εργαστηριακή κλίμακα (bench scale). Εκεί θα πάρει κανείς πληροφορίες για το **μηχανισμό της αντίδρασης**, οι οποίες θα επιτρέψουν την εξαγωγή του θεωρητικού κινητικού μοντέλου, ή αλλιώς το **ρυθμό της αντίδρασης** (reaction rate). Ο ρυθμός αυτός συνήθως απέχει από τον πραγματικό καθώς με την κλιμάκωση της διεργασίας θα εισέρθουν προβλήματα όπως: μη ιδανική ανάμειξη (στην περίπτωση των ομογενών αντιδράσεων μεταξύ υγρών), αντιστάσεις στη μεταφορά μάζας (στην περίπτωση των ετερογενών καταλυτικών αντιδράσεων).

3 Θεωρία

Στη συγκεκριμένη άσκηση θα επικεντρωθούμε στην ανάλυση μιας πολύ απλής αντίδρασης, της **αλκαλικής υδρόλυσης του οξικού αιθυλεστέρα**.



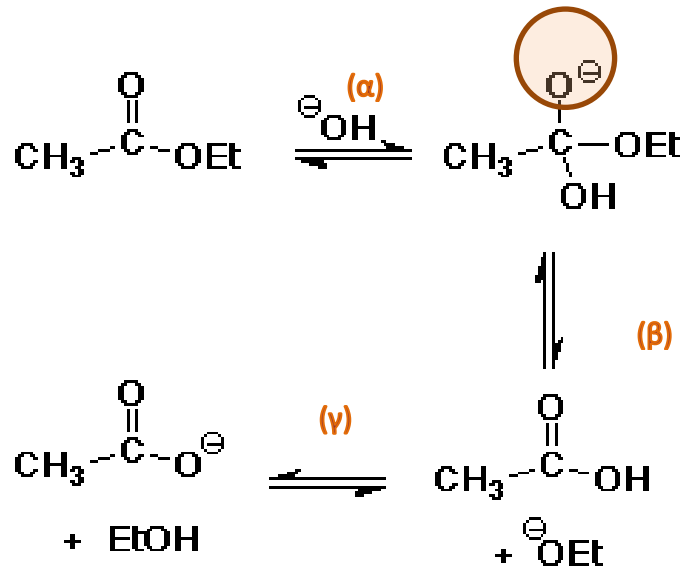
Η αντίδραση μελετάται σε συνθήκες **αρχικού ρυθμού**, εκεί δηλαδή που δεν έχουν παραχθεί ακόμα αρκετά προϊόντα για να συμβάλλουν στην αντίστροφη αντίδραση. Άρα σε πρώτο πλάνο γίνεται υπόθεση ότι ο αρχικός ρυθμός έχει μια μορφή όπως η παρακάτω:

$$r_0 = k[\text{EtOAc}]^\alpha [\text{OH}^-]^\beta \quad (2)$$

Επίσης για την **κινητική σταθερά k** γίνεται υπόθεση ότι ακολουθά την **εξίσωση Arrhenius**:

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3)$$

Σκοπός είναι να πραγματοποιηθούν κατάλληλα πειράματα έτσι ώστε να μπορούν να υπολογιστούν οι τιμές των παραμέτρων. Για μια αντίδραση που λαμβάνει χώρα με ένα συγκεκριμένο μηχανισμό στις εξεταζόμενες συνθήκες οι παράμετροι τις κινητικής (α, β, A, E_a) οφείλουν να είναι σταθερές. Η κινητική σταθερά επίσης σε συνθήκες σταθερής θερμοκρασίας οφείλει να είναι και αυτή σταθερά. Οι παράμετροι αυτοί θα αλλάξουν μόνο αν αλλάξει ο μηχανισμός της αντίδρασης. Ο **μηχανισμός** που έχει προταθεί για την παραπάνω αντίδραση είναι ο παρακάτω:



Σε αυτόν, το υδροξύλιο που βρίσκεται ελεύθερο στο διάλυμα επιτίθεται στον άνθρακα που φέρει την εστερική ομάδα και εξαναγκάζει το οξυγόνο της καρβονυλικής ομάδας να «τραβήξει» το ένα ζεύγος ηλεκτρονίων προς το μέρος του δημιουργώντας έτσι ένα αρνητικό φορτίο σε αυτό (α). Στη συνέχεια γίνεται διάσπαση του ενδιάμεσου προϊόντος σε οξικό οξύ και αιθοξείδιο (β). Τελευταίο βήμα είναι η μεταφορά ενός πρωτονίου από το οξικό οξύ στο αιθοξείδιο δημιουργώντας έτσι αιθανόλη και αιθανικό νάτριο (γ).

Για να πραγματοποιηθεί η παραπάνω μελέτη θα πρέπει να γνωρίζουμε τις συγκεντρώσεις σε κάθε χρονική στιγμή. Στη συγκεκριμένη περίπτωση αυτό επιτυγχάνεται εκμεταλλευόμενοι το γεγονός ότι κατά την αντίδραση τα αρνητικά ιόντα OH^- καταναλώνονται και στη θέση τους δημιουργούνται οξικά ανιόντα τα οποία έχουν μικρότερη ιοντική κινητικότητα. Αυτό σημαίνει ότι άγουν πιο ασθενώς το ρεύμα και άρα η μεταβολή αυτή των συγκεντρώσεων μπορεί να «μεταφραστεί» σε μεταβολή της **αγωγιμότητας** του διαλύματος. Είναι αυτονόητο ότι με το που ξεκινάει η αντίδραση τα μόνα είδη που συμβάλλουν στην αγωγιμότητα είναι τα θετικά ιόντα Na^+ και τα αρνητικά ιόντα OH^- (ο οξικός αιθυλεστέρας δε συμμετέχει στην αγωγιμότητα).

$$\kappa_{t=0} = \kappa_{\text{Na}^+} + \kappa_{\text{OH}^-} \quad (4)$$

Η παραπάνω σχέση προκύπτει από τον **νόμο του Kohlraush** που ισχύει για αραιά διαλύματα ιόντων και αναφέρει ότι η αγωγιμότητα ενός διαλύματος είναι ίση με το άθροισμα των αγωγιμοτήτων των ιοντικών ειδών του διαλύματος. Αν εισάγουμε και τις **μοριακές αγωγιμότητες** η (4) γίνεται:

$$\kappa_{t=0} = (\lambda_{\text{Na}^+} + \lambda_{\text{OH}^-})C_{B_0} \quad (5)$$

όπου C_{B_0} η αρχική συγκέντρωση υδροξειδίου του νατρίου. Με βάση την παραπάνω λογική, η αγωγιμότητα του διαλύματος μία τυχαία χρονική στιγμή θα είναι:

$$\kappa_{t=t} = (\lambda_{\text{Na}^+} C_{B_0} + \lambda_{\text{OH}^-} (C_{B_0} - C_C) + \lambda_{\text{OAc}^-} C_C) \quad (6)$$

όπου C_C η συγκέντρωση του παραγόμενου αιθανικού ανιόντος (CH_3COO^-). Αφαιρώντας τις (5) και (6) και λύνοντας ως προς C_C παίρνουμε την παρακάτω σχέση:

$$C_C = \frac{\kappa_{t=0} - \kappa_{t=t}}{\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{OAc}^-}} \quad (7)$$

Οι ποσότητες στον αριθμητή είναι μετρήσιμες ποσότητες. Οι ποσότητες στον παρονομαστή θα πρέπει να συσχετιστούν κάπως για να εισέλθουν στον υπολογισμό.

$$\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{EtO}^-} = \frac{\kappa_{\text{NaOH}} - \kappa_{\text{NaOAc}}}{C_0} \quad (8)$$

Η συσχέτιση γίνεται με μέτρηση των καθαρών ουσιών NaOH και NaOAc σε διαλύματα με ίδια συγκέντρωση C_0 για να μπορεί να ισχύει η παραπάνω σχέση. Η διαφορά στη σχέση (8) θα πρέπει να υπολογιστεί σε όλες τις θερμοκρασίες που θα λάβουν χώρα πειράματα. Άρα, μέσω της (7) μπορεί κανείς να μετρήσει σε κάθε στιγμή της αντίδρασης πόσο αιθανικό νάτριο έχει παραχθεί και συνεπώς πόσος οξικός αιθυλεστέρας και καυστικό νάτριο έχουν καταναλωθεί. Μέσω αυτών θα ευρεθεί ο αρχικός ρυθμός.

4 Πειραματική διάταξη

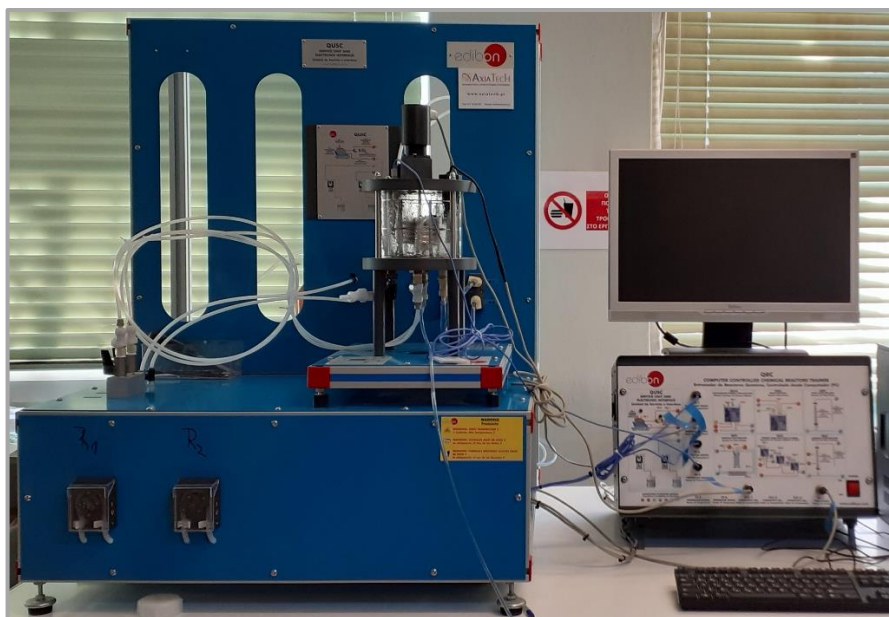
Η πειραματική διάταξη **QUSC** (Σχήματα 1-3) είναι κατά το μεγαλύτερο μέρος της αυτοματοποιημένη και επικοινωνεί με ένα **λογισμικό** (Σχήμα 3 και 4) από το οποίο ο χρήστης μπορεί:

- Να καταγράψει και να παρακολουθήσει μετρήσεις θερμοκρασίας και αγωγιμότητας
- Να ελέγξει το σύστημα ανάδευσης
- Να ελέγξει τις αντλίες τροφοδοσίας και την αντλία θερμαντικού
- Να ελέγξει τη θερμοκρασία του λουτρού με PID ρυθμιστή
- Να εισάγει διόρθωση της αγωγιμότητας για τη θερμοκρασία

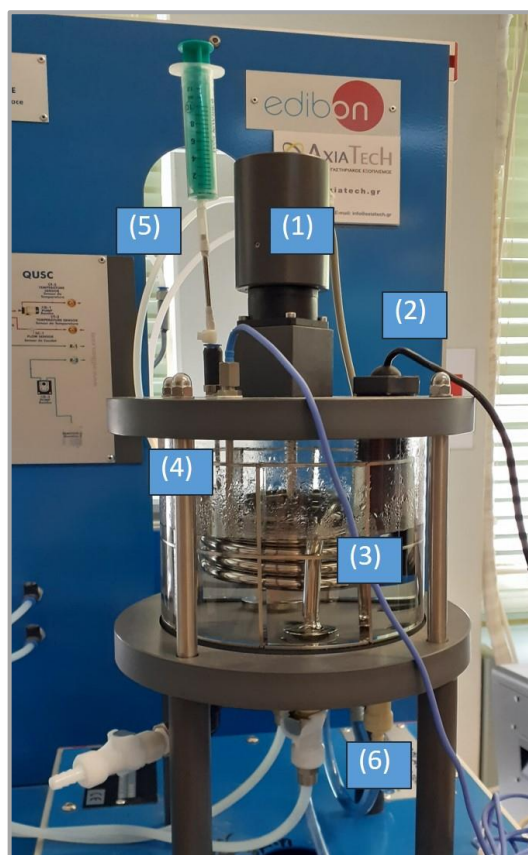
Τα κυριότερα μέρη της συσκευής είναι:

- Σύστημα **αντιδραστήρα QRCAC** (Σχήμα 2)
- Περισταλτική αντλία τροφοδοσίας AB-2
- Αντλία τροφοδοσίας του θερμαντικού από το θερμοστατούμενο λουτρό
- Λουτρό θερμαντικού
- Θερμοστοιχεία μέτρησης της θερμοκρασίας
- Αγωγιμόμετρο για μέτρηση αγωγιμότητας μέσα στον αντιδραστήρα

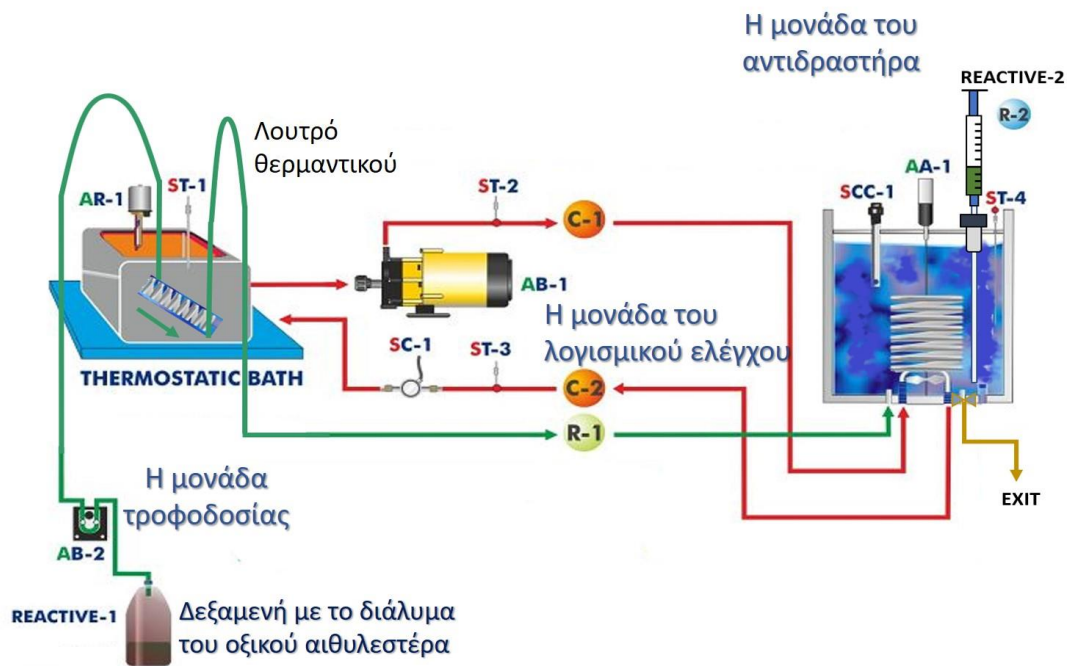
- Υπολογιστής με το λογισμικό ελέγχου της διάταξης και λήψη δεδομένων



Σχήμα 1. Πειραματική διάταξη QUSC, ο αντιδραστήρας *Batch* και η μονάδα λογισμικού ελέγχου και λήψης δεδομένων



Σχήμα 2. Διάταξη αντιδραστήρα QRCAC. (1) Σύστημα ανάδευσης, (2) Αγωγιμόμετρο, (3) Σπιράλ θέρμανσης, (4) θερμοστοιχείο, (5) Είσοδος για σύριγγα με βελόνα, (6) Βαλβίδα εκκένωσης



Σχήμα 3. Διάγραμμα ροής με αντιδραστήρα *BATCH*: Σε πράσινο οι σωληνώσεις, αντλία και βάνες για την τροφοδότηση του διαλύματος οξικού αιθυλεστέρα. Σε κόκκινο οι σωληνώσεις, αντλία και βάνες για την τροφοδότηση του θερμαντικού νερού.

edibon

CALIBRATE
START
STOP
VIEW DATA
QUIT

Καταγραφή και αποθήκευση δεδομένων

SENSORS

ST-1	20.8	°C
ST-2	20.7	°C
ST-3	21.4	°C
ST-4	21.9	°C

αισθητήρας ροής
SC-1 0.00 l/min

ACTUATORS

AR-1 Αντίσταση λουτρό

AB-1 Αντλία λουτρό προς αντιδραστήρα

AB-2 Περισταλτική αντλία τροφοδοσίας

AB-3 Περισταλτική αντλία τροφοδοσίας

Επιλογή Καταγραφής
SCC-1

Automatic Control
 PID on AR-1
ST-4 Set point: 40

Επιλογή θερμοκρασίας

Conductivity
Select COM: COM1
SCC-1 0.861 mS

Αγωγιμόμετρο

TEMP SENSOR: ST-4
%TEMP. FACTOR: 0

TEMP-COMPENSATION

Interface On?

Θερμοστοιχεία (μέσα στον αντιδραστήρα μόνο ST-4)

Σύστημα ανάδευσης

Σχήμα 4. Περιβάλλον του λογισμικού (Interface) για αντιδραστήρα *Batch*.

5 Πειραματική διαδικασία, αποτελέσματα και ζητούμενα

5.1 Μέρος 1 με βάση δεδομένων: Προσδιορισμός των μοριακών αγωγιμοτήτων – *Determination of the molar conductivities*

Στόχος του μέρους 1 είναι ο προσδιορισμός της διαφοράς των μοριακών αγωγιμοτήτων λ_{OH} και λ_{OAc^-} η οποία είναι απαραίτητη για την «μετάφραση» της άμεσα μετρούμενης αγωγιμότητας του διαλύματος κ στην συγκέντρωση του παραγόμενου αιθανικού νατρίου, C_A .

Απαραίτητα Στοιχεία

- Συσκευή QRC
- 1 l διάλυμα αιθανικού νατρίου CH_3COONa (NaOAc) 0.01 M
- 1 l διάλυμα καυστικού νατρίου NaOH 0.01 M

Διαδικασία

1. Εκκίνηση προγράμματος QRC.
2. Πατάμε START και δημιουργούμε ένα καινούριο αρχείο αποθήκευσης δεδομένων.

Σημείωση: Το αγωγιμόμετρο εφαρμόζει αυτόματα μια διόρθωση για μετρήσεις σε διαφορετικές θερμοκρασίες (η αγωγιμότητα είναι συνάρτηση της θερμοκρασίας). Αυτό συμβαίνει επειδή στη συγκεκριμένη περίπτωση η αγωγιμότητα θα μεταφραστεί σε συγκέντρωση αλλά η συγκέντρωση δεν εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Άρα θα πρέπει σε πειράματα όπου η θερμοκρασία μεταβάλλεται (π.χ. στο μέρος 4) η αγωγιμότητα να διορθώνεται αντίστοιχα ώστε να παραμένει πρακτικά σταθερή. Η διόρθωση αυτή είναι 2% για κάθε βαθμό °C πάνω ή κάτω από το set point, αλλά μπορεί να οριστεί από τον χρήστη ανάλογα με την περίπτωση (0 – 5%). Στο μέρος 1 έχει εξεταστεί ήδη η επίδραση της θερμοκρασίας. Θα οριστεί ο κατάλληλος παράγοντας διόρθωσης.

3. Απενεργοποιούμε τη διόρθωση από την κύρια οθόνη του προγράμματος.
4. Εισάγουμε το διάλυμα αιθανικού νατρίου $C_0 = 0.01$ M στον αντιδραστήρα με την αντίστοιχη περισταλτική αντλία μέχρι να εμβαπτιστεί το αγωγιμόμετρο σε αυτό.
5. Ανοίγουμε το κύκλωμα του θερμοστάτη και ρυθμίζουμε τη θερμοκρασία στους 25°C.
6. Ανοίγουμε το σύστημα ανάδευσης για να επιταχύνουμε την θέρμανση.
7. Καταγράφουμε την αγωγιμότητα του αιθανικού νατρίου στους 25°C.
8. Επαναλαμβάνουμε τη μέτρηση στους 30, 35, 40 και 45°C όταν η θερμοκρασία έχει σταθεροποιεί.
9. Αδειάζουμε τον αντιδραστήρα και ξεπλύνουμε με απεσταγμένο νερό μέχρι η ένδειξη της αγωγιμότητας να επανέλθει σε αυτήν του απεσταγμένου νερού.

10. Επαναλαμβάνουμε τα βήματα 4 - 9 αλλά αυτή τη φορά με το διάλυμα καυστικού νατρίου $C_0 = 0.01 \text{ M}$.
11. Συμπληρώνουμε πίνακα με τα Αποτελέσματα της μετρούμενης αγωγιμότητας, κ , των διαλυμάτων $\text{NaOAc } 0.01 \text{ M}$ και $\text{NaOH } 0.01 \text{ M}$ συναρτήσει της θερμοκρασίας.

5.2 Πειραματικό Μέρος 2: Εύρεση της τάξης της αντίδρασης ως προς τον οξικό αιθυλεστέρα. Αντιδραστήρας διαλείποντος έργου

Determination of the reaction order with respect to the ethyl acetate. Initial rate method. Batch operation

Στόχος του μέρος 2 είναι ο προσδιορισμός της τάξης του ρυθμού της αντίδρασης ως προς το ένα αντιδρών (EtOAc), χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του αρχικού ρυθμού r_0 .

Απαραίτητα Στοιχεία

- Συσκευή QRC
- Σύριγγα με βελόνα
- Ογκομετρικές φιάλες των 2 l
- Κωνική φιάλη των 25 ml
- Οξικός αιθυλεστέρας (ethyl acetate) Analytical Grade
- Απεσταγμένο νερό γύρω στα 7 l

Διαδικασία

1. Παρασκευή διαλύματος 0.005 M οξικού αιθυλεστέρα (EtOAc) στις ογκομετρικές των 2 l.
2. Εκκίνηση προγράμματος QRC.
3. Πατάμε START και δημιουργούμε ένα καινούριο αρχείο αποθήκευσης δεδομένων.
4. Εισάγουμε στον αντιδραστήρα μια ποσότητα διαλύματος EtOAc (~200 ml) για να γεμίσουν οι γραμμές με το επιθυμητό διάλυμα.
5. Ανοίγουμε τη βαλβίδα αποστράγγισης και την κλείνουμε όταν αδειάσει ο αντιδραστήρας.
6. Εισάγουμε στον αντιδραστήρα 1 l διαλύματος EtOAc .
7. Ανοίγουμε το σύστημα θερμοστάτη και επιλέγουμε σταθερή θερμοκρασία 25°C .
8. Ανοίγουμε το σύστημα ανάδευσης και περιμένουμε το διάλυμα να φτάσει την επιθυμητή θερμοκρασία.
9. Πατάμε START.
10. Εισάγουμε στο σύστημα με ένεση 5 ml καυστικού νατρίου 1 M .
11. Λαμβάνουμε μετρήσεις ανά τακτά διαστήματα και μετά από ικανοποιητική μεταβολή της συγκέντρωσης σταματάμε την λήψη δεδομένων.
12. Αδειάζουμε τον αντιδραστήρα από την βαλβίδα εκκένωσης.

13. Επαναλαμβάνουμε τα βήματα 4 - 12 για διαφορετική συγκέντρωση EtOAc (0.01 M – 0.05 M).

5.3 Πειραματικό Μέρος 3: Εύρεση της τάξης της αντίδρασης ως προς το υδροξείδιο του νατρίου.

Batch λειτουργία αντιδραστήρα – Determination of the reaction order with respect to the sodium hydroxide. Initial rate method. Batch operation.

Στόχος του μέρους 3 είναι ο προσδιορισμός της τάξης του ρυθμού της αντίδρασης ως προς το ένα αντιδρών (NaOH), χρησιμοποιώντας τη μέθοδο της αρχικής ταχύτητας r_0 .

Απαραίτητα Στοιχεία

- Συσκευή QRC
- Σύριγγα με βελόνα
- Βαρέλι των 5 l
- Κωνική φιάλη των 25 ml
- Οξικός αιθυλεστέρας (ethyl acetate) Analytical Grade
- Απεσταγμένο νερό γύρω στα 7 l

Διαδικασία

1. Παρασκευή διαλύματος 0.02 M οξικού αιθυλεστέρα (EtOAc) στα 5 l.
2. Εκκίνηση προγράμματος QRC.
3. Πατάμε START και δημιουργούμε ένα καινούριο αρχείο αποθήκευσης δεδομένων.
4. Εισάγουμε στον αντιδραστήρα μια ποσότητα διαλύματος EtOAc (~200 ml) για να γεμίσουν οι γραμμές με το επιθυμητό διάλυμα.
5. Ανοίγουμε τη βαλβίδα αποστράγγισης και την κλείνουμε όταν αδειάσει ο αντιδραστήρας.
6. Εισάγουμε στον αντιδραστήρα 1 l διαλύματος EtOAc.
7. Ανοίγουμε το σύστημα θερμοστάτη και επιλέγουμε σταθερή θερμοκρασία 25°C.
8. Ανοίγουμε το σύστημα ανάδευσης και περιμένουμε το διάλυμα να φτάσει την επιθυμητή θερμοκρασία.
9. Εισάγουμε στο σύστημα με ένεση 1 ml καυστικού νατρίου 1 M.
10. Λαμβάνουμε μετρήσεις ανά τακτά διαστήματα και μετά από ικανοποιητική μεταβολή της συγκέντρωσης σταματάμε την λήψη δεδομένων.
11. Αδειάζουμε τον αντιδραστήρα από την βαλβίδα αποστράγγισης.
12. Επαναλαμβάνουμε τα βήματα 4-12 για διαφορετική ποσότητα ένεσης NaOH (2 – 6 ml).

5.4 Μέρος 4: Μεταβολή της κινητικής σταθεράς με τη θερμοκρασία. Εύρεση παραμέτρων εξίσωσης Arrhenius – Rate constant variation with temperature. Calculation of Arrhenius equation parameters.

Στόχος του μέρος 4 είναι ο προσδιορισμός της εξάρτησης της κινητικής σταθεράς της αντίδρασης από τη θερμοκρασία και ο υπολογισμός των παραμέτρων της εξίσωσης Arrhenius.

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

Το A είναι γνωστό ως προ-εκθετικός παράγοντας (pre-exponential factor) και το E_a είναι η ενέργεια ενεργοποίησης (activation energy) της αντίδρασης.

Απαραίτητα Στοιχεία

- Συσκευή QRC
- Βαρέλι των 5 l
- Κωνική φιάλη των 25 ml
- Σύριγγα με βελόνα
- Οξικός αιθυλεστέρας (ethyl acetate) Analytical Grade
- Απεσταγμένο νερό γύρω στα 7 l.

Διαδικασία

1. Παρασκευή διαλύματος 0.01 M οξικού αιθυλεστέρα (EtOAc) στα 5 l.
2. Εκκίνηση προγράμματος QRC.
3. Πατάμε START και δημιουργούμε ένα καινούριο αρχείο αποθήκευσης δεδομένων.
4. Εισάγουμε στον αντιδραστήρα μια ποσότητα διαλύματος EtOAc (~200 ml) για να γεμίσουν οι γραμμές με το επιθυμητό διάλυμα.
5. Ανοίγουμε τη βαλβίδα αποστράγγισης και την κλείνουμε όταν αδειάσει ο αντιδραστήρας
6. Εισάγουμε στον αντιδραστήρα 1 l διαλύματος EtOAc.
7. Ανοίγουμε το σύστημα θερμοστάτη και επιλέγουμε σταθερή θερμοκρασία 30°C.
8. Ανοίγουμε το σύστημα ανάδευσης και περιμένουμε το διάλυμα να φτάσει την επιθυμητή θερμοκρασία
9. Εισάγουμε στο σύστημα με ένεση 5 ml καυστικού νατρίου 1 M.
10. Λαμβάνουμε μετρήσεις ανά τακτά διαστήματα και μετά από ικανοποιητική μεταβολή της συγκέντρωσης σταματάμε την λήψη δεδομένων.
11. Αδειάζουμε τον αντιδραστήρα από την βαλβίδα αποστράγγισης.
12. Επαναλαμβάνουμε τα βήματα 4-12 για διαφορετική θερμοκρασία αντίδρασης (35, 40, 45°C).

6 Επεξεργασία αποτελεσμάτων – ζητούμενα της άσκησης

Κάθε ομάδα παραδίδει μια έκθεση, η οποία περιλαμβάνει

- a. το αρχείο EXCEL και
- b. το υπόλοιπο γραπτό (με τις γραφικές παραστάσεις!) σε μορφή pdf.

ακολουθώντας τις γενικές οδηγίες που έχουν δοθεί στις [Οδηγίες για το Εργαστήριο Διεργασιών Ι](#). Η τελική μορφή των κειμένων που θα δημοσιευθούν θα πρέπει να ακολουθεί πιστά τις οδηγίες συγγραφής που δίνονται στο παράδειγμα ([πρότυπο για την έκθεση](#)). Παρακαλώ, **ΜΗ συμπιέστε** τα δύο αρχεία σε ένα (ούτε rar ούτε zip). Έχετε την δυνατότητα να ανεβάστε δυο αρχεία καθώς για τις ατομικές και ομαδικές εργασίες (Μέγιστο μέγεθος αρχείου: 100M).

Κάθε έκθεση ελέγχεται για λογοκλοπή με το πρόγραμμα [Turnitin](#). Σε περίπτωση [λογοκλοπής](#) άνω του 30%, η έκθεση θα αξιολογηθεί με 0/10.

Ζητούνται τα ακόλουθα στην ενότητα της θεωρίας:

- (1) Γράψτε τις δύο εξισώσεις αντίδρασης για την όξινη και αλκαλική υδρόλυση του οξικού αιθυλεστέρα. Σε ποια από τις δύο περιπτώσεις ο καταλύτης αναγεννάται και ποιος είναι αυτός; Στην άλλη περίπτωση συμμετέχει το νερό στην αντίδραση;
- (2) Αν στην αντίδραση δευτέρας τάξης $r = [\text{EtOAc}][\text{NaOH}]$ η συγκέντρωση του καυστικού νατρίου είναι 3 τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη αυτής του οξικού αιθυλεστέρα, τότε η αντίδραση μπορεί να θεωρηθεί πρώτης τάξης ως προς τον οξικό αιθυλεστέρα.
Σωστό ή Λάθος; Εξηγήστε την απάντησή σας.

Ζητούνται τα ακόλουθα στην ενότητα της πειραματικής διάταξης και διαδικασίας:

- (1) Υπολογισμός για την παρασκευή των απαιτούμενων διαλυμάτων: οξικού αιθυλεστέρα (EtOAc) στις ογκομετρικές των 2 l.
- (2) ΠΟΛΥ σύντομη περιγραφή της διάταξης με βάση το Σχήμα 3.

Ζητούνται τα ακόλουθα στην ενότητα των αποτελεσμάτων:

Μέρος 1 με βάση δεδομένων: Προσδιορισμός του διορθωτικού παράγοντα των αγωγιμοτήτων και των μοριακών αγωγιμοτήτων

Με τα παρακάτω αποτελέσματα του πίνακα 1,

- (1) Να υπολογιστεί για κάθε θερμοκρασία η διαφορά των μοριακών αγωγιμοτήτων $\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{OAc}^-}$ (η οποία είναι απαραίτητη για την «μετάφραση» της άμεσα μετρούμενης αγωγιμότητας του διαλύματος κ στην συγκέντρωση του παραγόμενου αιθανικού νατρίου, C_A).
- (2) Να οριστεί από το γράφημα ($\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{OAc}^-}$) vs T ($^{\circ}\text{C}$) ο παράγοντας διόρθωσης, (να περάσετε ένα γραμμικό fit στα δεδομένα).

Πίνακας 1: Αποτελέσματα της μετρούμενης αγωγιμότητας, κ , των διαλυμάτων NaOAc 0.01 M και NaOH 0.01 M συναρτήσει της θερμοκρασίας.

T ($^{\circ}\text{C}$)	κ_{NaOH} ($\text{mS}\cdot\text{cm}^{-1}$)	κ_{NaOAc} ($\text{mS}\cdot\text{cm}^{-1}$)	$\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{OAc}^-} = \frac{(\kappa_{\text{NaOH}} - \kappa_{\text{NaOAc}})}{C_0}$ ($\text{mS}\cdot\text{cm}^{-1}$)/($\text{l}\cdot\text{mol}^{-1}$)
15	1.952	0.637	
20	2.132	0.742	
30	2.500	0.926	
40	2.860	1.114	

Στην έκθεση της αλκαλικής υδρόλυσης χρειάζονται δεδομένα και από άλλες ομάδες. Πέρα από τα excel (τα οποία περιέχουν τις μετρήσεις αγωγιμότητας και θερμοκρασίας συναρτήσει του χρόνου) χρειάζονται και τις αρχικές συγκεντρώσεις των αντιδρώντων, οι οποίες αναγράφονται ΜΟΝΟ στα φύλλα μετρήσεων της κάθε ομάδας.

για το μέρος 2

- ✓ οι 3 διαφορετικές συγκεντρώσεις του EtOAc, $C_{A,0}$ (M) που χρησιμοποιήθηκαν.
- ✓ η αρχική συγκέντρωση NaOH, $C_{B,0}$ (M) (η οποία παραμένει σταθερή και για τις 3 διαφορετικές μετρήσεις)

για το μέρος 3

- ✓ η αρχική συγκέντρωση του EtOAc, $C_{A,0}$ (M) (η οποία παραμένει σταθερή και για τις 3 διαφορετικές μετρήσεις)
- ✓ οι 3 διαφορετικές συγκεντρώσεις NaOH, $C_{B,0}$ (M) που χρησιμοποιήθηκαν.

για το μέρος 4

- ✓ η αρχική συγκέντρωση του EtOAc, $C_{A,0}$ (M) και NaOH, $C_{B,0}$ (M) (η οποία παραμένει σταθερή και για τις 3 διαφορετικές μετρήσεις)

Έστω

- $C_{A,0}$ (M) αρχική συγκέντρωση EtOAc

- V , όγκος επιβολής NaOH (ml)
- $C_{B,0}$ (M), αρχική συγκέντρωση διαλύματος NaOH
- T (°C) θερμοκρασία του πειράματος
- $(\lambda_{OH^-} - \lambda_{OAc^-})$ ο παράγοντας διόρθωσης

(3) Συμπληρώστε πίνακες όπως ο παρακάτω με τις αρχικές συγκεντρώσεις των αντιδρώντων (από τα φύλλα μετρήσεων) και τις πραγματικές θερμοκρασίες (από τα αρχεία excel). Συμπληρώστε επίσης τον παράγοντα διόρθωσης το οποίο θα οριστεί από την κλίση του γραφήματος στο ερώτημα (2).

Πίνακας 3: Πειραματικά δεδομένα της αλκαλικής υδρόλυσης.

ομάδα			$C_{A,0}$ (M)			V_{NaOH} (ml)			$C_{B,0}$ (M)		
	Μέρος 2	EtOAc									
	Μέρος 3	NaOH									
	Μέρος 4	TEMP									

ομάδα			Θερμοκρασία (°C)			παράγοντας διόρθωσης ($\lambda_{OH^-} - \lambda_{OAc^-}$)		
	Μέρος 2	EtOAc						
	Μέρος 3	NaOH						
	Μέρος 4	TEMP						

Επεξεργασία των μετρήσεων στα μέρη 2, 3 και 4.

Σημείωση 1: Η καταγραφή της αγωγιμότητας ξεκινάει πάντα λίγα δευτερόλεπτα πριν την ένεση του υδατικού NaOH στον αντιδραστήρα. Με την έναρξη της αντίδρασης η αγωγιμότητα αυξάνεται απότομα, φτάνει στην υψηλότερη τιμή της και πέφτει ξανά. Ο αισθητήρας της αγωγιμότητας έχει αργή απόκριση και το σύστημα καθυστερεί στη μέτρηση. Για να έχουν νόημα τα διαγράμματα και οι υπολογισμοί σας θα πρέπει να κρατήσετε μόνο το γραμμικό μέρος των καμπυλών ώστε να έχετε μια καλή ευθεία. Για μια σωστή επεξεργασία των μετρήσεων προτείνονται τα παρακάτω βήματα:

- ✓ Κατασκευάζουμε μια γραφική παράσταση της μετρούμενης αγωγιμότητας συναρτήσει του χρόνου για μια συγκέντρωση.
- ✓ Διαγράφουμε τις αρχικές τιμές μέχρι την υψηλότερη τιμή της αγωγιμότητας.
- ✓ Να υπολογιστεί η κλίση (ο ρυθμός μεταβολής της αγωγιμότητας ανά μονάδα χρόνου).
- ✓ Παρακολουθώντας τον συντελεστή συσχέτισης διαγράφουμε της τελικές τιμές μέχρι την υψηλότερη τιμή του.
- ✓ Αποθηκεύουμε μόνο της μετρήσεις του γραμμικού μέρος της καμπύλης για τον υπόλοιπο υπολογισμό.
- ✓ Δεν είναι απαραίτητα να συμπεριλαμβάνετε αυτά τα βοηθητικά διαγράμματα στην έκθεσή σας.

Μέρος 2: Εύρεση της τάξης της αντίδρασης ως προς τον οξικό αιθυλεστέρα

- (4) Συμπληρώστε πίνακες όπως ο παρακάτω (μόνο στο excel) για κάθε διαφορετική συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα που δοκιμάσατε με μόνο των μετρήσεων του γραμμικού μέρους της καμπύλης.

Πίνακας 2: Αποτελέσματα της μετρούμενης αγωγιμότητας, κ , της συγκέντρωσης αιθανικού νατρίου C_C (M), και της συγκέντρωσης οξικού αιθυλεστέρα C_A (M) για μια δεδομένη συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα.

χρόνος (s)	μετρούμενη αγωγιμότητα ($\text{mS}\cdot\text{cm}^{-1}$)	συγκέντρωση αιθανικού νατρίου C_C (M)	συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα C_A (M)

Όπως είδατε στη θεωρία, η συγκέντρωση του παραγόμενου αιθανικού νατρίου θα υπολογιστεί μέσω της μετρούμενης αγωγιμότητας και της διαφοράς $\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{OAc}^-}$ που υπολογίστηκε στο Μέρος 1 της Άσκησης μέσω της παρακάτω σχέσης:

$$C_C = \frac{\kappa_{t=t} - \kappa_{t=0}}{\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{OAc}^-}}$$

Σημείωση 2: Για τον υπολογισμό της συγκέντρωσης οξικού αιθυλεστέρα C_A .

Με βάση την εξίσωση (7) και την απλή και απαραίτητη μεταβολή της θα βρείτε την μετατροπή της αγωγιμότητας σε συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα C_A . Με δεδομένα

- ✓ η αρχική συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα $[\text{EtOAc}]_{in} \rightarrow C_{A,0}$ από την πειραματική διάταξη.
- ✓ η στοιχειομετρία της αντίδρασης, εξίσωση (1).
- ✓ η εξίσωση για την μετατροπή της αγωγιμότητας σε συγκέντρωση αιθανικού νατρίου $\rightarrow C_C$ εξίσωση (7) \equiv παραπάνω εξίσωση

- (5) Σχεδιάστε για κάθε διαφορετική συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα την χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης του (**ένα κοινό γράφημα για όλες της συγκεντρώσεις**). Η κλίση του διαγράμματος αντιπροσωπεύει την αρχική ταχύτητα της αντίδρασης

$$r_0 = \left(\frac{dC_A}{dt} \right)_{t=0}$$

(6) Συμπληρώστε τον παρακάτω πίνακα:

Πίνακας 3: Αρχικός ρυθμός της αντίδρασης για διαφορετική συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα.

αρχική συγκέντρωση EtOAc, $C_{A,0}$ (M)	r_0

Ένας τρόπος εξαγωγής της τάξης της αντίδρασης ως προς το ένα αντιδρών είναι να φέρετε την εξίσωση ρυθμού της αντίδρασης σε γραμμική μορφή εκμεταλλευόμενοι το γεγονός ότι η αρχική συγκέντρωση του NaOH (B) είναι σταθερή σε όλα τα πειράματα και οι μόνες μεταβλητές είναι ο αρχικός ρυθμός r_0 και η αρχική συγκέντρωση του οξικού αιθυλεστέρα (A):

$$r_0 = k[A]_0^{\alpha}[B]_0^{\beta} \quad \xrightarrow{\ln} \quad \ln(r_0) = \ln(k[B]_0^{\beta}) + \alpha \ln([A]_0)$$

Τελικά

(7) μπορείτε να βρείτε την τάξη της αντίδρασης ως προς τον οξικό αιθυλεστέρα βρίσκοντας την κλίση της παραπάνω ευθείας.

Μέρος 3: Εύρεση της τάξης της αντίδρασης ως προς το υδροξείδιο του νατρίου.

(8) Συμπληρώστε πίνακες όπως ο παρακάτω (μόνο στο excel) για κάθε διαφορετική συγκέντρωση καυστικού νατρίου που δοκιμάσατε με μόνο των μετρήσεων του γραμμικού μέρος της καμπύλης:

Πίνακας 4: Αποτελέσματα της μετρούμενης αγωγιμότητας, κ , της συγκέντρωσης αιθανικού νατρίου C_C (M), και της συγκέντρωσης οξικού αιθυλεστέρα C_A (M) για μια δεδομένη συγκέντρωση καυστικού νατρίου.

χρόνος (s)	μετρούμενη αγωγιμότητα ($\text{mS}\cdot\text{cm}^{-1}$)	συγκέντρωση αιθανικού νατρίου C_C (M)	συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα C_A (M)

Όπως είδατε στη θεωρία, η συγκέντρωση του παραγόμενου αιθανικού νατρίου θα υπολογιστεί μέσω της μετρούμενης αγωγιμότητας και της διαφοράς $\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{OAc}^-}$ που υπολογίστηκε στο Μέρος 1 μέσω της παρακάτω σχέσης:

$$C_C = \frac{\kappa_{t=t} - \kappa_{t=0}}{\lambda_{\text{OH}^-} - \lambda_{\text{OAc}^-}}$$

- (9) Σχεδιάστε για κάθε διαφορετική συγκέντρωση καυστικού νατρίου την χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης του οξικού αιθυλεστέρα (ένα κοινό γράφημα για όλες της συγκεντρώσεις). Η κλίση του διαγράμματος αντιπροσωπεύει την αρχική ταχύτητα της αντίδρασης

$$r_0 = \left(\frac{dC_A}{dt} \right)_{t=0}$$

- (10) Συμπληρώστε τον παρακάτω πίνακα:

Πίνακας 5: Αρχικός ρυθμός της αντίδρασης για διαφορετική συγκέντρωση καυστικού νατρίου.

αρχική συγκέντρωση NaOH, $C_{B,0}$ (M)	r_0

Ένας τρόπος εξαγωγής της τάξης της αντίδρασης ως προς το ένα αντιδρών είναι να φέρετε την εξίσωση ρυθμού της αντίδρασης σε γραμμική μορφή και εκμεταλλευόμενοι το γεγονός ότι η αρχική συγκέντρωση του EtOAc (A) είναι σταθερή σε όλα τα πειράματα και οι μόνες μεταβλητές είναι ο αρχικός ρυθμός r_0 και η αρχική συγκέντρωση του καυστικού νατρίου (B):

$$r_0 = k[A]_0^a[B]_0^\beta \quad \xrightarrow{\ln} \quad \ln(r_0) = \ln(k[A]_0^a) + \beta \ln([B]_0)$$

Τελικά

- (11) μπορείτε να βρείτε την τάξη της αντίδρασης ως προς το καυστικό νάτριο βρίσκοντας την κλίση της παραπάνω ευθείας.

Μέρος 4: Μεταβολή της κινητικής σταθεράς με τη θερμοκρασία.

- (12) Συμπληρώστε πίνακες όπως ο παρακάτω (μόνο στο excel) για κάθε διαφορετική θερμοκρασία που δοκιμάσατε με μόνο των μετρήσεων του γραμμικού μέρος της καμπύλης:

Πίνακας 4: Αποτελέσματα της μετρούμενης αγωγιμότητας, κ , της συγκέντρωσης αιθανικού νατρίου C_C (M), και της συγκέντρωσης οξικού αιθυλεστέρα C_A (M) για μια δεδομένη συγκέντρωση καυστικού νατρίου.

χρόνος (s)	μετρούμενη αγωγιμότητα ($\text{mS}\cdot\text{cm}^{-1}$)	συγκέντρωση αιθανικού νατρίου C_C (M)	Συγκέντρωση οξικού αιθυλεστέρα C_A (M)

Παίρνοντας τους λογάριθμους της εξίσωσης *Arrhenius*, μπορούμε να τη φέρουμε σε γραμμική μορφή:

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

Έχοντας την εξίσωση ρυθμού γνωστή από τα μέρη 2 και 3

- (13) Υπολογίστε τις κινητικές σταθερές σε κάθε θερμοκρασία που εξετάστηκε.
 (14) Σχεδιάστε το διάγραμμα $\ln(k)$ vs $1/T$.
 (15) Υπολογίστε τις τιμές της ενέργειας ενεργοποίησης, E_A και του προ-εκθετικού παράγοντα, A , και συμπληρώστε τις τιμές του πίνακα.

Πίνακας 6: Ενέργεια ενεργοποίησης, E_A .

Κλίση	Τέμνουσα	E_A (kcal · mol ⁻¹)	A (l · mol ⁻¹ s ⁻¹)

Μέρος 5 με βάση δεδομένων: Υπολογισμός των παραμέτρων α , β , A , E_A από όλα τα πειραματικά δεδομένα (Rate parameters calculation from experimental data)

Στόχος του μέρους 5 είναι ο υπολογισμός των παραμέτρων της εξίσωσης ρυθμού από τα παραπάνω πειραματικά δεδομένα (μέρη 2-4) σε ένα βήμα με τη μέθοδο μη γραμμικής παλινδρόμησης (non-linear regression).

Παράμετροι είναι οι ποσότητες που παραμένουν σταθερές (α , β , A , E_A) και δεν εξαρτώνται από τις συνθήκες όπως θερμοκρασία και συγκεντρώσεις πέραν εξαιρέσεων. Όπως θα δείτε, ο υπολογισμός με τη μέθοδο μη γραμμικής παλινδρόμησης είναι ένα πολύ ισχυρό εργαλείο σε περιπτώσεις μεγάλου όγκου δεδομένων και όταν υπάρχει καλή αρχική εκτίμηση των παραμέτρων.

Σημείωση 3: Καταστρώστε ένα φύλλο excel με τα δεδομένα σας (συγκεντρώσεις οξικού αιθυλεστέρα και καυστικού νατρίου, θερμοκρασία, αρχικός ρυθμός) οργανωμένα σε στήλες. Επιπλέον ορίστε ένα πίνακα με αρχικές εκτιμήσεις για τις παραμέτρους σας. Σε μία καινούρια στήλη ορίστε τον υπολογιζόμενο ρυθμό με βάση τις παραμέτρους που ορίστηκαν εξ αρχής. Μια καλή εκτίμηση είναι οι τιμές που υπολογίστηκαν στις παραπάνω ασκήσεις.

Ορίστε το σφάλμα ανάμεσα στον μετρούμενο και υπολογιζόμενο ρυθμό ως $(r_{meas} - r_{estim})^2$ και ορίστε σε ένα κελί το άθροισμα των σφαλμάτων. Το κελί αυτό θα είναι η αντικειμενική συνάρτηση που θα πρέπει να ελαχιστοποιηθεί. Ο solver του excel θα ελαχιστοποιήσει αυτό το κελί αλλάζοντας τα κελιά των παραμέτρων.

(Δείτε ένα παράδειγμα στο [youtube με non-linear regression στο excel](https://www.youtube.com/watch?v=Ewp5CF5ba_w&ab_channel=TaylorSparks) για να σας βοηθήσει.

https://www.youtube.com/watch?v=Ewp5CF5ba_w&ab_channel=TaylorSparks)

- (16) Παρουσιάστε σε πίνακα τις τιμές των παραμέτρων που υπολογίστηκαν από τη μη γραμμική παλινδρόμηση, από τις προηγούμενες ασκήσεις και τις βιβλιογραφικές τιμές.
- (17) Υπολογίστε το σφάλμα μεταξύ των υπολογιζόμενων παραμέτρων και των βιβλιογραφικών τιμών αναφέροντας τον τύπο σφάλματος που χρησιμοποιήσατε.
- (18) Δώστε 3 πιθανές εξηγήσεις για την προέλευση του σφάλματος.
- (19) Κατασκευάστε διάγραμμα συσχέτισης (parity plot) μεταξύ της υπολογιζόμενης και μετρούμενης τιμής. Το διάγραμμα να περιέχει την ευθεία $y = bx$ και να υπολογιστεί το R^2 για αυτήν τη ευθεία ώστε να δείτε κατά πόσο οι υπολογισμένες τιμές του ρυθμού ταιριάζουν με τις μετρούμενες.

7 Βιβλιογραφία

- [1] [Edibon](#) teaching equipment for engineering and technical education
- [2] [QRQC](#) (Computer Controlled Chemical Reactors Training System, Edibon)
- [3] H. Tsujikawa, H Inou "The reaction rate of the Alkaline Hydrolysis of Ethyl Acetate", *Bulletin of the Chem. Soc. Of Japan*, **39** (1966) 1837-1842
- [4] A. Mukhtar, U. Shafiq, A. F. Khan, H. A. Qadir and M. Qizilbash "Estimation of Parameters of Arrhenius Equation for Ethyl Acetate Saponification Reaction", *Res. J. Chem. Sci.* **5(11)**, 1-6 (2015)