Supplementary Material

Improvements in the modeling and kinetics processes of the enzymatic synthesis of pentyl acetate

Beatriz Lorenzo, Luis Fernández, Juan Ortega,* and Leandro Domínguez

Division of Thermal Engineering & Instrumentation (IDeTIC). Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, 35017 Las Palmas de Gran Canaria, Spain
* Correspondence: juan.ortega@ulpgc.es

Table S1. Experimental physical properties measured at 298.15 K for the compounds used in this work.

Compound	CAS No.	Purity (w/w%)	ρ /kg·m^{-3}		n_D	
			exp.	lit.	exp.	lit.
pentan-1-ol	71-41-0	>99.0	810.92	811.50[a]	1.4060	1.4079[a]
				810.97[b]		1.4077[b]
acetic acid	64-19-7	>99.5	1043.61	1043.66[a]	1.3690	1.3698[a]
				1043.95[c]		1.36969[c]
pentyl acetate	628-63-7	>99.0	872.08	871.9[a,e]	1.3990	1.4000[d]
				872.19[d]		
hexane	110-54-3	>99.0	654.78	654.81[a]	1.3725	1.37226[a]
				654.82[b]		1.3725[b]

[a][28]; [b][29]; [c][30]; [d][31]; [e][32]

Table S2. Parametrization obtained for Equation (1), and *RMSE* by Equation (2).

k'_1	k'_2	k'_3	k'_4	k'_5	k'_6
1.0780	1.0000	3.4244×10^{-2}	9.0632×10^{2}	2.2982×10^{1}	1.9031×10^{-6}
k'_7	k'_8	k'_9	k'_{10}		*RMSE*, Equation (2)
4.3542×10^{-2}	7.5048×10^{1}	7.5343	9.6127×10^{-1}		0.067

Table S3. Parameters used for the calculation of mass transfer effectiveness factors

Constant parameters							
d_p / μm	452	V_{acid} / cm^3·mol^{-1}	63.93	M_{acid} / g·mol^{-1}	60.05	μ_{acid} / cP	0.9036
a / cm^{-1}	132.626	$V_{alcohol}$ / cm^3·mol^{-1}	123.53	$M_{alcohol}$ / g·mol^{-1}	88.15	$\mu_{alcohol}$ / cP	2.2966
Sh	2	φ_{acid}	1.62	M_{hexane} / g·mol^{-1}	86.18	$D^{o}_{acid,alcohol}$ / cm^2·s^{-1}	7.82×10^{-6}
ε_p	0.5	$\varphi_{alcohol}$	1.00	T / K	313.15	$D^{o}_{alcohol,acid}$ / cm^2·s^{-1}	1.41×10^{-5}
τ_p	6	φ_{hexane}	1.00				

Changing parameters related to external mass transfer													
Exp.	$x_{0,acid}$	$x_{0,alcohol}$	$r_{0,obs}$ / $\mathrm{mol \cdot mol_{total}^{-1} \cdot min^{-1}}$	μ_m / cP	$D_{acid,m}$ / cm^2·s^{-1}	$D_{alcohol,m}$ / cm^2·s^{-1}	$k_{L,acid}$ / cm·s^{-1}	$k_{L,alcohol}$ / cm·s^{-1}	$Da_{obs,acid}$	$Da_{obs,alcohol}$	$\eta_{E,acid}$	$\eta_{E,alcohol}$
1	0.10	0.10	3.265×10^{-4}	0.3628	4.93×10^{-5}	3.32×10^{-5}	2.18×10^{-3}	1.47×10-3	1.88×10^{-4}	2.80×10^{-4}	0.999	0.999
2	0.14	0.14	2.442×10^{-4}	0.4165	4.31×10^{-5}	2.90×10^{-5}	1.90×10^{-3}	1.28×10-3	1.15×10^{-4}	1.71×10^{-4}	0.999	0.999
3	0.18	0.18	5.388×10^{-4}	0.4780	3.76×10^{-5}	2.54×10^{-5}	1.66×10^{-3}	1.12×10-3	2.26×10^{-4}	3.36×10^{-4}	0.999	0.999
4	0.25	0.25	1.143×10^{-3}	0.6085	2.97×10^{-5}	2.00×10^{-5}	1.31×10^{-3}	8.85×10^{-4}	4.37×10^{-4}	6.49×10^{-4}	0.999	0.999
5	0.50	0.50	2.101×10^{-4}	1.4405	1.05×10^{-5}	1.05×10^{-5}	4.63×10^{-4}	4.63×10^{-4}	1.14×10^{-4}	1.14×10^{-4}	0.999	0.999
6	0.10	0.20	8.219×10^{-4}	0.4517	3.96×10^{-5}	2.67×10^{-5}	1.75×10^{-3}	1.18×10-3	5.89×10^{-4}	4.37×10^{-4}	0.999	0.999
7	0.14	0.28	1.107×10^{-3}	0.5659	3.17×10^{-5}	2.14×10^{-5}	1.40×10^{-3}	9.45×10^{-4}	7.08×10^{-4}	5.25×10^{-4}	0.998	0.999
8	0.18	0.36	1.178×10^{-3}	0.7090	2.54×10^{-5}	1.71×10^{-5}	1.12×10^{-3}	7.57×10^{-4}	7.32×10^{-4}	5.43×10^{-4}	0.998	0.999
9	0.25	0.50	1.466×10^{-3}	1.0520	1.72×10^{-5}	1.16×10^{-5}	7.62×10^{-4}	5.13×10^{-4}	9.67×10^{-4}	7.18×10^{-4}	0.998	0.998
10	0.33	0.67	1.019×10^{-3}	1.6828	9.51×10^{-6}	9.51×10^{-6}	4.20×10^{-4}	4.20×10^{-4}	9.14×10^{-4}	4.57×10^{-4}	0.998	0.999
11	0.10	0.30	5.872×10^{-4}	0.5622	3.19×10^{-5}	2.15×10^{-5}	1.41×10^{-3}	9.49×10^{-4}	5.23×10^{-4}	2.59×10^{-4}	0.999	0.999
12	0.14	0.42	7.872×10^{-4}	0.7689	2.34×10^{-5}	1.58×10^{-5}	1.03×10^{-3}	6.97×10^{-4}	6.83×10^{-4}	3.38×10^{-4}	0.999	0.999
13	0.18	0.54	9.397×10^{-4}	1.0516	1.72×10^{-5}	1.16×10^{-5}	7.59×10^{-4}	5.12×10^{-4}	8.64×10^{-4}	4.28×10^{-4}	0.998	0.999
14	0.25	0.75	7.747×10^{-4}	1.8189	9.05×10^{-6}	9.05×10^{-6}	4.00×10^{-4}	4.00×10^{-4}	9.73×10^{-4}	3.24×10^{-4}	0.998	0.999

Table S3. (continued)

Changing parameters related to internal mass transfer													
Exp.	$x_{0,\text{acid}}$	$x_{0,\text{alcohol}}$	$r_{0,\text{obs}}$ / $\text{mol}\cdot\text{mol}_{\text{total}}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$	$D_{\text{acid},m}$ / $\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$	$D_{\text{alcohol},m}$ / $\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$	$D_{\text{eff,acid}}$ / $\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$	$D_{\text{eff,alcohol}}$ / $\text{cm}^2\cdot\text{s}^{-1}$	$\Phi_{\text{obs,acid}}$	$\Phi_{\text{obs,alcohol}}$	ϕ_{acid}	ϕ_{alcohol}	$\eta_{\text{I,acid}}$	$\eta_{\text{I,alcohol}}$
1	0.10	0.10	3.265×10^{-4}	4.93×10^{-5}	3.32×10^{-5}	4.11×10^{-6}	2.77×10^{-6}	7.53×10^{-4}	1.12×10^{-3}	2.74×10^{-2}	3.34×10^{-2}	0.999	0.999
2	0.14	0.14	2.442×10^{-4}	4.31×10^{-5}	2.90×10^{-5}	3.59×10^{-6}	2.42×10^{-6}	4.60×10^{-4}	6.84×10^{-4}	2.14×10^{-2}	2.62×10^{-2}	0.999	0.999
3	0.18	0.18	5.388×10^{-4}	3.76×10^{-5}	2.54×10^{-5}	3.14×10^{-6}	2.11×10^{-6}	9.04×10^{-4}	1.34×10^{-3}	3.01×10^{-2}	3.67×10^{-2}	0.999	0.999
4	0.25	0.25	1.143×10^{-3}	2.97×10^{-5}	2.00×10^{-5}	2.48×10^{-6}	1.67×10^{-6}	1.75×10^{-3}	2.60×10^{-3}	4.18×10^{-2}	5.10×10^{-2}	0.999	0.998
5	0.50	0.50	2.101×10^{-4}	1.05×10^{-5}	1.05×10^{-5}	8.74×10^{-7}	8.74×10^{-7}	4.56×10^{-4}	4.56×10^{-4}	2.14×10^{-2}	2.14×10^{-2}	0.999	0.999
6	0.10	0.20	8.219×10^{-4}	3.96×10^{-5}	2.67×10^{-5}	3.30×10^{-6}	2.23×10^{-6}	2.36×10^{-3}	1.75×10^{-3}	4.86×10^{-2}	4.19×10^{-2}	0.998	0.999
7	0.14	0.28	1.107×10^{-3}	3.17×10^{-5}	2.14×10^{-5}	2.65×10^{-6}	1.78×10^{-6}	2.83×10^{-3}	2.10×10^{-3}	5.33×10^{-2}	4.59×10^{-2}	0.998	0.999
8	0.18	0.36	1.178×10^{-3}	2.54×10^{-5}	1.71×10^{-5}	2.12×10^{-6}	1.43×10^{-6}	2.93×10^{-3}	2.17×10^{-3}	5.41×10^{-2}	4.66×10^{-2}	0.998	0.999
9	0.25	0.50	1.466×10^{-3}	1.72×10^{-5}	1.16×10^{-5}	1.44×10^{-6}	9.68×10^{-7}	3.87×10^{-3}	2.87×10^{-3}	6.23×10^{-2}	5.36×10^{-2}	0.998	0.998
10	0.33	0.67	1.019×10^{-3}	9.51×10^{-6}	9.51×10^{-6}	7.92×10^{-7}	7.92×10^{-7}	3.66×10^{-3}	1.83×10^{-3}	6.05×10^{-2}	4.28×10^{-2}	0.998	0.999
11	0.10	0.30	5.872×10^{-4}	3.19×10^{-5}	2.15×10^{-5}	2.66×10^{-6}	1.79×10^{-6}	2.09×10^{-3}	1.04×10^{-3}	4.58×10^{-2}	3.22×10^{-2}	0.999	0.999
12	0.14	0.42	7.872×10^{-4}	2.34×10^{-5}	1.58×10^{-5}	1.95×10^{-6}	1.31×10^{-6}	2.73×10^{-3}	1.35×10^{-3}	5.23×10^{-2}	3.68×10^{-2}	0.998	0.999
13	0.18	0.54	9.397×10^{-4}	1.72×10^{-5}	1.16×10^{-5}	1.43×10^{-6}	9.64×10^{-7}	3.46×10^{-3}	1.71×10^{-3}	5.88×10^{-2}	4.14×10^{-2}	0.998	0.999
14	0.25	0.75	7.747×10^{-4}	9.05×10^{-6}	9.05×10^{-6}	7.54×10^{-7}	7.54×10^{-7}	3.89×10^{-3}	1.30×10^{-3}	6.25×10^{-2}	3.60×10^{-2}	0.997	0.999

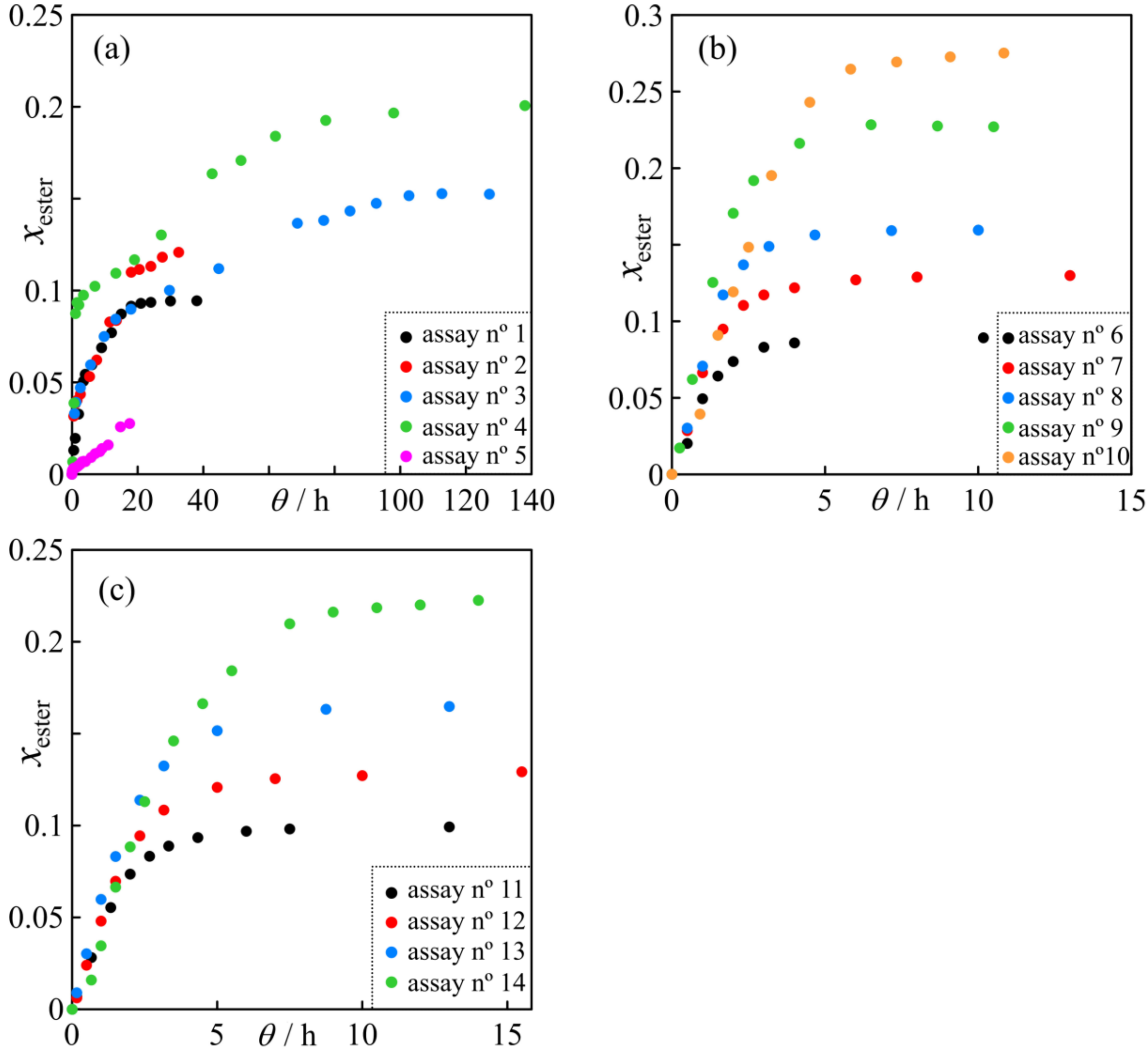

Figure S1. Plots of ester molar fraction *vs* θ-time. Effect of acetic acid initial molar fractions on reaction kinetics at several alcohol/acid molar ratio: (a) $x_{0,alcohol}/x_{0,acid}$=1; (b) $x_{0,alcohol}/x_{0,acid}$=2; (c) $x_{0,alcohol}/x_{0,acid}$=3.

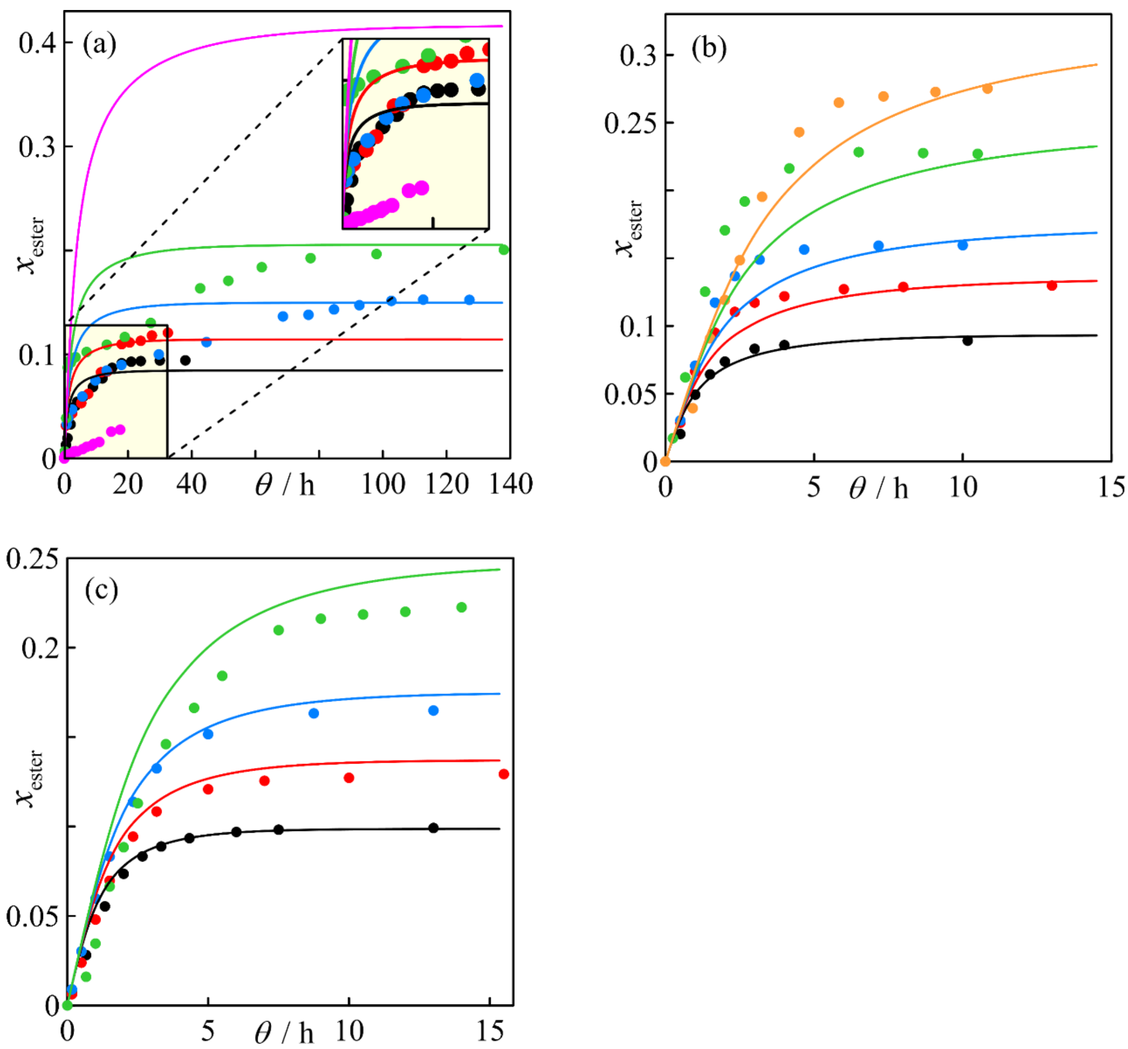

Figure S2. Experimental results and modeling according to the ratios $x_{0,alcohol}/x_{0,acid}$, and for different $x_{0,acid}$ values: (a) $x_{0,alcohol}/x_{0,acid}$=1; (b) $x_{0,alcohol}/x_{0,acid}$=2; (c) $x_{0,alcohol}/x_{0,acid}$=3. (●) 0.10; (●) 0.14; (●) 0.18; (●) 0.25; (●) 0.33; (●) 0.50. The coloured-lines correspond to the representation by modeling using Equation (1).

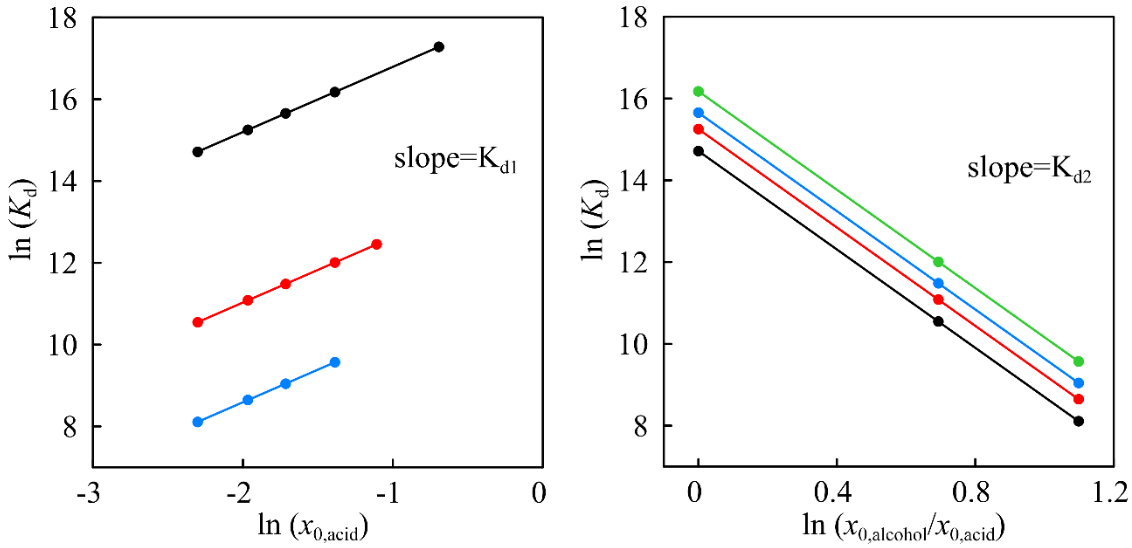

Figure S3. Graphical representation of the empirical correlation Equation (4).