

PREDIKSI KESETIMBANGAN UAP-CAIR SISTEM BINER TERSIER BUTANOL + ISOAMIL ALKOHOL MENGGUNAKAN HUKUM RAOULT

Fannania S. Erdiyanti, Asalil Mustain

Jurusan Teknik Kimia

fannaniasetyo@gmail.com, [asalil89@polinema.ac.id]

ABSTRAK

Prediksi Kesetimbangan Uap-Cair bertujuan untuk mengetahui kesetimbangan uap-cair sistem biner Tersier-Butanol + Isoamil Alkohol pada tekanan 101,3 kPa dan mengkorelasikan sistem biner tersebut dengan model *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)*. Prediksi diawali dengan menentukan fraksi mol campuran biner tersier butanol + isoamil alkohol dengan menggunakan persamaan Hukum Raoult pada tekanan 101,3 kPa, dimana tekanan uap total campuran cairan biner tergantung pada tekanan uap komponen murni dan fraksi molnya dalam campuran. Kemudian, data kesetimbangan yang didapat dikorelasikan dengan perhitungan model *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)*. Hasil prediksi dan korelasi menunjukkan hasil yang baik dikarenakan *root mean square deviation (RMSD)* dari hasil prediksi dan korelasi *UNIQUAC* diperoleh hasil yang relatif kecil. Parameter interaksi biner yang diperoleh dari hasil korelasi sangat berguna untuk optimasi kolom distilasi dalam proses pemurnian bioetanol.

Kata Kunci: kesetimbangan uap-cair, hukum raoult, *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)*

ABSTRACT

The Prediction of Vapor-Liquid Equilibrium is intended to find out the vapor-liquid equilibrium of binary systems for Tert-Butanol + Isoamyl Alcohol at 101,3 kPa and correlates that binary system with the Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC). Prediction begins by determining the tertier butanol + isoamyl alcohol mixture of mole fraction with Raoult's equation at 101,3 kPa, which is a total pressure of binary mixture is depend on pure component vapor pressure and mole fraction in its mixture. Then, the equilibrium data that have been obtained was correlated with the Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC) calculation model. The result of the prediction and correlation showed good results because of the root mean square deviation (RMSD) between the prediction and the correlation values were relative low. Binary interaction parameters that have been obtained is very useful to optimize the distillation column at bioethanol purification process.

Keywords: vapor-liquid equilibrium, raoult's law, *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)*

1. PENDAHULUAN

Pembuatan bioetanol yang dapat dijadikan sebagai bahan bakar alternatif dapat menggantikan bahan bakar fosil. Seperti yang telah diketahui, persediaan energi yang berupa minyak fosil lambat laun akan mencapai kondisi keterbatasan, karena alam tidak mampu membuat bahan bakar jenis ini dengan waktu yang relatif cepat. Bioetanol memiliki

keunggulan daripada bahan bakar minyak karena mengandung emisi gas CO lebih rendah sekitar 19-25% [1]. Pada umumnya, bioetanol diproduksi secara fermentasi dari berbagai jenis bahan alam seperti tebu [2], jagung [3], jerami gandum [4], bakau [5] dan alga [6]. Pembuatan *biofuel* khususnya pada proses pembuatan bioetanol, produk yang dihasilkan dari proses fermentasi mengandung sekitar 4-10% [7] massa etanol, sehingga diperlukan proses pemurnian lebih lanjut. Hal ini penting dikarenakan *fusel oil* yang masih banyak impuritasnya akan memberikan efek buruk pada spesifikasi produk akhir, pada proses distilasi akan dihasilkan etanol dengan tingkat kemurnian mencapai 90%. Pada proses pemurnian bioetanol tersebut, minyak fusel yang dihasilkan dapat dimanfaatkan sebagai bahan baku untuk kepentingan industri lain. Pemanfaatan minyak fusel ini diharapkan mampu memaksimalkan keuntungan pabrik bioetanol dengan menggunakan metode fermentasi [8]. Dalam merancang kolom distilasi (seperti tinggi kolom dan jumlah *tray*), diperlukan pengetahuan tentang kesetimbangan uap-cair/ *Vapor Liquid Equilibrium (VLE)* dari campuran komponen-komponen yang akan dimurnikan [9].

Di mana pada penelitian sebelumnya, data kesetimbangan uap-cair sistem biner yang mengandung komponen hasil fermentasi pada produksi bioetanol tersebut telah dikompilasi oleh Mustain, dkk [10,11]. Salah satu pasangan sistem biner yang masih belum banyak diteliti adalah sistem tersier butanol dan isoamil alkohol. Maka dari itu, perlu dilakukan pengukuran terhadap data kesetimbangan uap-cair sistem biner tersier butanol + isoamil alkohol yang akan digunakan sebagai korelasi data antara eksperimen dengan perhitungan sehingga berguna untuk optimasi desain kolom distilasi pada proses pemurnian produksi bioetanol.

2. METODOLOGI PENELITIAN

Prediksi kesetimbangan uap-cair sistem biner aseton + amil alkohol diawali dengan Prediksi kesetimbangan uap-cair sistem biner tersier butanol + isoamil alkohol diawali dengan menentukan fraksi mol untuk campuran sistem biner tersier butanol + isoamil alkohol dari 0 sampai dengan 1. Data kesetimbangan uap-cair dihitung menggunakan persamaan Hukum Raoult pada tekanan 101,3 kPa. Setelah itu, data yang telah terkumpul tersebut dikorelasikan dengan model perhitungan *UNIQUAC*.

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hubungan kesetimbangan uap-cair didefinisikan sebagai berikut :

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^0 \quad (1)$$

P_i^0 adalah tekanan uap jenuh komponen murni yang dihitung melalui rumus *extended Antoine* sebagai berikut :

$$\ln P_i^0 = A_1 + \frac{B_2}{T+C_2} + D_4 T + E_5 \ln T + F_6 T^{G_7} \quad (2)$$

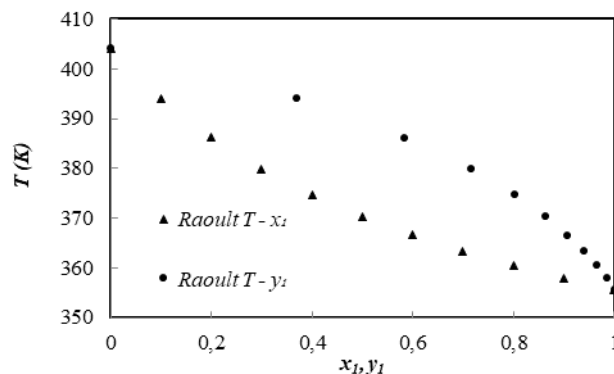
Dimana, P_i^0 dalam kPa, T dalam K. dan nilai A_1 sampai G_7 merupakan koefisien *extended Antoine*.

Prediksi kesetimbangan uap-cair dilakukan dengan menetapkan fraksi mol dari 0-1 untuk sistem biner tersier butanol (1) + isoamil alkohol (2) yang dilakukan dengan persamaan Hukum Raoult Eq (1) pada tekanan 101,3 kPa yang setelahnya dapat diperoleh

fraksi uap dan cair dari masing-masing komponen seperti yang ditunjukkan pada Tabel 1 dan kurva kesetimbangan pada Gambar 1.

Tabel 1. Hasil prediksi kesetimbangan uap-cair sistem biner tersier butanol (1) + isoamil alkohol (2)

<i>T</i> (K)	<i>x</i> ₁	<i>y</i> ₁
404,16	0	0,0000
394,08	0,1	0,3687
386,23	0,2	0,5819
379,93	0,3	0,7146
374,74	0,4	0,8023
370,38	0,5	0,8632
366,63	0,6	0,9072
363,37	0,7	0,9399
360,49	0,8	0,9649
357,93	0,9	0,9844
355,62	1	10,000



Gambar 1. Prediksi kurva kesetimbangan tersier butanol (1) + isoamil alkohol (2)

Hasil prediksi kesetimbangan uap-cair tersier butanol dan isoamil alkohol (Tabel 2) selanjutnya dikorelasi menggunakan perhitungan model *UNIQUAC* yang dideskripsikan pada persamaan berikut [12]:

$$\ln y_i = \ln \frac{\phi_i}{\alpha_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{\alpha_i} \sum_j^N x_j l_j - q_i \ln \left(\sum_j^N \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \sum_j^N \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_k^N \theta_k \tau_{ki}} \quad (3)$$

Parameter biner:

$$A_{ij}, A_{ji}, B_{ij}, \text{ dan } B_{ji} \quad (4)$$

Dimana:

$$i = 1 \ j = 2 \ \text{atau} \ i = 2 \ j = 1 \quad (4)$$

$$\Phi_1 = \frac{x_1 r_1}{\sum_k^N r_k x_k} \tag{5}$$

$$\theta_1 = \frac{x_1 q_1}{\sum_k^N q_k x_k} \tag{6}$$

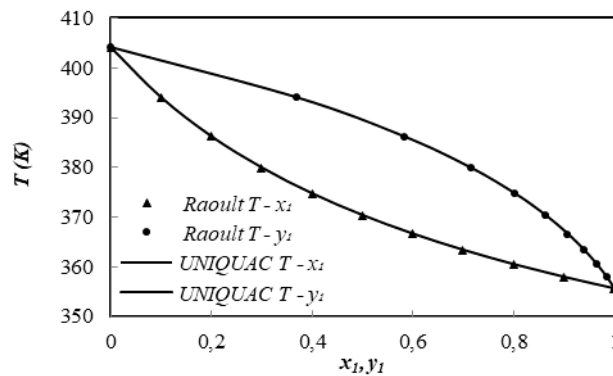
$$\tau_{ij} = \exp\left(a_{ij} + \frac{B_{ij}}{T}\right) \quad \tau_{ji} = \exp\left(a_{ji} + \frac{B_{ji}}{T}\right) \tag{7}$$

$$l_i = \frac{z}{2}(r_i - q_i) - (r_i - 1) \tag{8}$$

$$l_j = \frac{z}{2}(r_j - q_j) - (r_j - 1) \tag{9}$$

dan $z = 10$ (10)

Hasil korelasi antara prediksi dan model perhitungan *UNIQUAC* dapat ditunjukkan pada Gambar 2 dan spesifik parameter pada Tabel 2.



Gambar 2. Kurva kesetimbangan korelasi hasil prediksi menggunakan Hukum Raoult dengan *UNIQUAC* sistem tersier butanol (1) + isoamil alkohol (2).

Tabel 2. Parameter hasil korelasi *UNIQUAC* untuk sistem tersier butanol (1) + isoamil alkohol (2) pada tekanan 101,3 kPa.

Sistem	A_{ij}	A_{ji}	B_{ij} (K)	B_{ji} (K)
Tersier Butanol (1) + Isoamil Alkohol (2)	-0,314	0,139	14,274	-14,595

Berdasarkan Gambar 2, perbandingan data menunjukkan hasil yang bagus karena data yang didapat dari hasil eksperimen hampir sama dengan perhitungan *UNIQUAC*. Hal ini ditunjukkan dengan banyaknya titik eksperimen pada gambar yang dilewati oleh garis model *UNIQUAC* pada Gambar 2. Selain itu, pernyataan ini juga didukung oleh nilai *root mean square deviation (RMSD)* antara hasil eksperimen dengan perhitungan *UNIQUAC* yang ditunjukkan Tabel 3. Nilai *root mean square deviation (RMSD)* ini dapat diperoleh dari rumus:

$$RMSD \Delta M = \left(\frac{1}{n_p} \sum_{k=1}^{n_p} (M_k^{cal} - M_k^{exp})^2 \right)^{0,5} \quad (11)$$

Tabel 3. RMSD antara hasil prediksi dan perhitungan model *UNIQUAC* sistem tersier butanol (1) + isoamil alkohol (2) pada tekanan 101,3 kPa

<i>T</i> Raoult (K)	<i>T</i> UNIQUAC (K)	RMSD ΔT (K)
404,16	404,16	0,000
394,08	394,09	0,001
386,23	386,23	0,000
379,93	379,93	0,000
374,74	374,74	0,001
370,38	370,37	0,001
366,63	366,63	0,001
363,37	363,37	0,001
360,49	360,49	0,001
357,93	357,93	0,000
355,62	355,62	0,000

4. KESIMPULAN DAN SARAN

Hasil prediksi kesetimbangan tersier butanol dan isoamil alkohol menggunakan Hukum Raoult telah dilakukan pada tekanan 101,3 kPa dan dikorelasi dengan perhitungan model *UNIQUAC* secara baik dengan hasil *root mean square deviation (RMSD)* yang relatif kecil.

Prediksi dapat dilakukan dengan menetapkan interval fraksi mol yang lebih kecil sehingga hasil perhitungan dan korelasi dapat menghasilkan kurva yang lebih baik lagi.

REFERENSI

- [1] Syam, K.L., Farikha, J., dan Fitriana, D.N. 2009. "Pemanfaatan Limbah Pod Kakao Untuk Menghasilkan Bioetanol Sebagai Sumber Energi Terbarukan". Institut Pertanian Bogor: Bogor.
- [2] Cardona, C.A., Quintero, J.A., Paz, I.C. 2010. "Production of Bioethanol from Sugarcane Bagasse: Status and Perspectives". *Bioresour Technology*, 101, 4754-4766.
- [3] Nikolić, S., Mojović, L., Rakin, M., Pejcin, D. 2009. "Bioethanol Production from Corn Meal by Simultaneous Enzymatic Saccharification and Fermentation with Immobilized Cells of *Saccharomyces cerevisiae* var. *Ellipsoideus*". *Journal Fuel*, 88, 9, 1602-1607.
- [4] Talebnia, F., Karakashev, D., Angelidaki, I. 2010. "Production of Bioethanol from Wheat Straw: An Overview on Pretreatment, Hydrolysis and Fermentation". *Bioresour Technology*, 101, 13, 4744-4753.
- [5] Saravanakumar, K., Senthilraja, P., Kathiresan, K. 2013. "Bioethanol Production by Mangrove-derived Marine Yeast, *Sacchromyces Cerevisiae*". *Journal of King Saud University - Science*, 25, 121-127.
- [6] Li, K., Liu, S., Liu, X. 2014. "An Overview of Algae Bioethanol Production". *International Journal Energy Res*, 38, 965-977.
- [7] Hamelinck, C., Hooijdonk, G., Faaij, A., 2003, *Prospect for ethanol from lignocellulosic biomass, Techno-economic performance as development progress of University Utrecht Copernius Institute Science Technology Society*.
- [8] Duran, J.A., Cordoba, F.P., Gil, I.D., Rodriguez, G. dan Orjuela, A. 2013. "Vapor-Liquid Equilibrium of the Ethanol + 3-Methyl-1-butanol System at 50.66, 101.33 and 151.99 kPa, Fluid Phase Equilib". 338, 128-134.
- [9] Kuswandi, Winarsih, Hartono, D., Wibowo, A.A. Pengukuran Kesetimbangan Uap Cair Sistem Biner Etanol Etil Asetat dan Etanol Isoamil Alkohol Pada Tekanan 101337999 dan 2667 kP. 2011.
- [10] Mustain, A., Hartanto, D., Altway, S. 2016a. "Compilation of Extended Binary Interaction Parameters for Alcohols Mixtures Encountered in Alcohol Separation Process ". *ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences*, 11, 3465-3472.
- [11] Mustain, A., Takwanto, A. , Hartanto, D. 2016b. "Parameter Interaksi Biner Kesetimbangan Uap-Cair Campuran Alkohol untuk Optimasi Proses Pemurnian Bioetanol". *Jurnal Bahan Alam Terbarukan*, 2, 37-44.
- [12] Abrams, D.S. , Prausnitz, J.M. 1975. "Statistical thermodynamics of liquid mixtures: A new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible systems". *AIChE Journal*, 21, 116-128.