

STUDI KASUS PENGARUH *FEED FLOW RATE* DAN SUHU OPERASI TERHADAP PEMBENTUKAN PROPIL ASETAT PADA REAKTOR *EQUILIBRIUM CHEMCAD*

Miranda Amiroh Sulaiman, Christyfani Sindhuwati

Jurusan Teknik Kimia

miranda.amiroh@hotmail.com, [c.sindhuwati@polinema.ac.id]

ABSTRAK

Pembentukan propil asetat didapatkan melalui reaksi esterifikasi antara propanol dengan asam asetat. Reaksi esterifikasi termasuk dalam reaksi *reversible* sehingga penambahan katalis atau penggunaan ekseks pada salah satu reaktan dapat menggeser reaksi ke arah produk. ChemCAD digunakan untuk membantu simulasi proses dengan menggunakan reaktor jenis ekuilibrium. Fitur *sensitivity study* pada ChemCAD digunakan untuk mengetahui perbandingan mol umpan yang terbaik. Variabel yang digunakan meliputi perbandingan *feed flowrate* dan suhu reaksi pada reaktor. Rasio mol propanol terhadap asam asetat bervariasi dari 1:1 sampai 1:9 dan suhu reaksi antara 30°C sampai 100°C dengan tekanan pada 1 atm. Hasil n-propil asetat terbaik diperoleh saat perbandingan umpan 10 kmol/jam propanol dan 10 kmol/jam asam asetat dengan suhu reaktor pada 30°C.

Kata kunci: *n-Propil asetat, reaktor ekuilibrium, esterifikasi, ChemCAD*

ABSTRACT

The formation of propyl acetate is obtained through the esterification reaction between propanol and acetic acid. Esterification reaction is included in the reversible reaction so that the addition of a catalyst or the use of excess in one of the reactant can shift the reaction toward the product. ChemCAD is used to help the process simulations using equilibrium type reactors. The sensitivity study feature in ChemCAD is used to find out the best mole ratio of the feed. The variables used include the ratio of feed flowrate and reaction temperature at the reactor. The mole ratio of propanol to acetic acid was varied from 1:1 to 1:9 and the reaction temperature between 30°C to 100°C with a pressure at 1 atm. The best n-propyl acetate results were obtained when the feed ratio of 10 kmol/hour propanol : 10 kmol/hour acetic acid with the reactor temperature at 30°C.

Keywords: *n-Propyl acetate, equilibrium reactor, esterification, ChemCAD*

1. PENDAHULUAN

Reaktor merupakan alat penting pada proses kimia dimana merubah bahan mentah menjadi produk yang layak dijual. Pada proses pembuatan propil asetat, reaktor memiliki peranan yang sangat besar untuk menentukan berapa banyak propanol dan asam asetat yang terkonversi menjadi propil asetat. Penelitian tentang propil asetat hanya sedikit yang telah dilakukan. Oleh karena itu, dengan adanya penelitian ini dapat menambah referensi tentang propil asetat. Simulasi pembuatan propil asetat menggunakan reaktor ekuilibrium dengan suhu 60°C. Feed yang digunakan n-propanol (10 kmol/jam) dan asam asetat (13 kmol/jam) masing-masing pada suhu 25°C dan

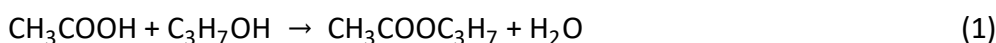
tekanan 101,3 kPa menghasilkan konversi n-propanol sebesar 60%. Laju alir asam asetat diatur berlebih untuk memastikan konversi n-propanol yang maksimal [1].

n-Propil asetat adalah senyawa kimia yang digunakan sebagai pelarut, seperti pelarut untuk selulosa nitrat dan bahan mentah untuk kosmetik. Senyawa ini biasanya disintesis dengan reaksi esterifikasi asam asetat dan n-propanol. Jenis reaksi esterifikasi ini biasanya terbatas kesetimbangannya dan laju reaksinya dapat dipercepat dengan penambahan katalis, baik homogen atau heterogen. Katalis asam kuat merupakan katalis yang sering digunakan pada pembuatan ester [2].

Reaksi esterifikasi adalah contoh dari reaksi kesetimbangan yang terbatas. Konversi yang dihasilkan biasanya rendah karena batas yang ditentukan oleh kesetimbangan termodinamika. Ester dan air sebagai produk samping diperoleh dari reaksi ini [3]. Termasuk dalam jenis reaksi reversible, konstanta keseimbangan atau konversi dari reaksi umumnya dapat ditingkatkan dengan metode sebagai berikut:

- (1) menggunakan eksese pada salah satu reaktan,
- (2) menggunakan zat dehidrasi,
- (3) menghilangkan air dengan cara fisik seperti distilasi, dan
- (4) penambahan katalis [4].

Berikut adalah reaksi esterifikasi propanol dan asam asetat:



Reaksi esterifikasi termasuk dalam reaksi *reversible*, sehingga pemilihan reaktor pada ChemCAD digunakan jenis ekuilibrium. Reaktor ekuilibrium digunakan saat satu atau lebih reaksi terjadi. Reaktor ekuilibrium dapat mensimulasi beberapa reaksi dalam satu waktu dengan membutuhkan data ekuilibrium atau konversi untuk setiap reaksi [5]. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui pengaruh perbandingan *mol rate* pada *feed* dan suhu operasi terhadap pembentukan propil asetat.

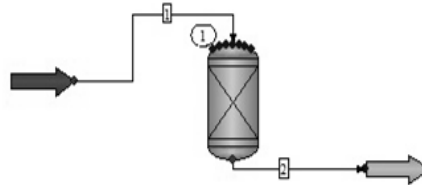
2. METODOLOGI PENELITIAN

Studi kasus penentuan pengaruh *feed flowrate* dan suhu operasi terhadap pembentukan propil asetat dilakukan dengan *software* simulasi proses ChemCAD. Penentuan *feed flowrate* yang optimum didapatkan melalui *trial* pada ChemCAD dengan mencari perbandingan antara n-propanol dan asam asetat yang dapat menghasilkan propil asetat secara optimum. Trial dilakukan dengan cara menggunakan fitur *sensitivity study* pada ChemCAD.

2.1. Deskripsi Proses

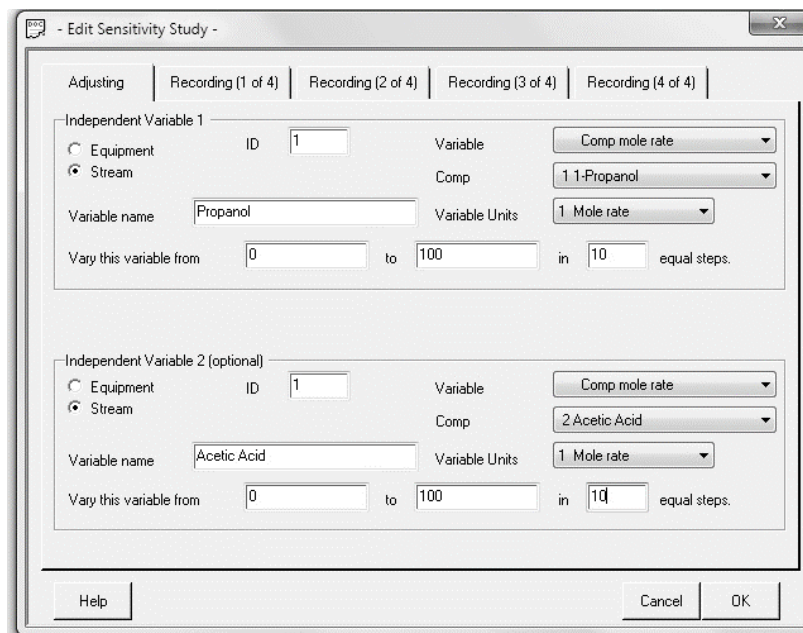
Umpan yang digunakan adalah n-propanol dan asam asetat dengan penambahan katalis asam sulfat untuk mempercepat reaksi. Produk yang dihasilkan dari reaksi esterifikasi ini adalah propil asetat dan air. Komponen yang dipilih pada ChemCAD adalah n-propanol, asam asetat, asam sulfat, propil asetat dan air. Model termodinamika yang digunakan pada simulasi ini adalah NRTL. Proses dirangkai seperti yang terlihat pada gambar 1. Suhu dan tekanan pada umpan adalah 25°C dan 101,3 kPa. Flowrate dari umpan pertama diatur dengan perbandingan n-propanol (10 kmol/jam) dan asam asetat (20 kmol/jam). Laju alir dari salah satu reaktan dibuat berlebih untuk memastikan konversi reaktan maksimal ke arah produk. Variabel komposisi feed

flowrate, propanol:asam asetat dilakukan dari 1:1 sampai 1:9 dengan asam asetat sebagai reaktan yang berlebih. Reaktor yang digunakan adalah jenis ekuilibrium. Suhu reaktor divariasi dari 40°C sampai 100°C. Pada input pertama, reaktor ditetapkan pada suhu 60°C. *Thermal mode* menggunakan isothermal pada suhu 60°C dan *specify calculation mode* menggunakan *Approach ΔT*. Setelah semua telah diinputkan, proses dapat di *run*.



Gambar 1. Rangkaian proses pada simulasi ChemCAD

Fitur *sensitivity study* pada ChemCAD digunakan untuk mengetahui pengaruh komposisi *feed flowrate* terhadap pembentukan propil asetat. Variabel yang akan diamati pada simulasi ini adalah mol rate dari kedua feed yaitu, propanol dan asam asetat terhadap mol rate dan fraksi propil asetat yang terdapat pada produk. Pengaturan *sensitivity study* dapat dilihat pada gambar 2. Grafik dan tabel akan muncul saat *run* telah selesai dilakukan. Berdasarkan data dari *sensitivity study* dapat diketahui komposisi *feed* yang dapat menghasilkan propil asetat dengan maksimal. Ketika sudah mendapatkan komposisi feed, dilakukan simulasi terhadap variable suhu operasi yaitu pada suhu 30 °C, 40 °C, 50 °C, 60 °C, 70 °C, 80 °C, dan 90 °C.



Gambar 2. Pengaturan fitur *sensitivity study* pada ChemCAD

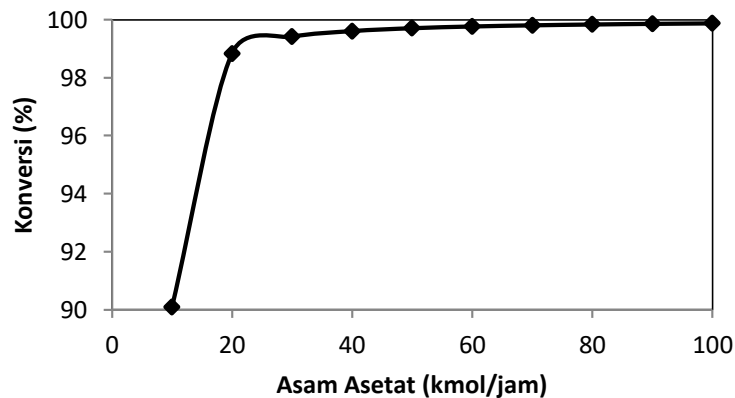
3. HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1. Pengaruh Feed Flowrate terhadap Pembentukan Propil Asetat

Hasil simulasi dari simulasi proses pembentukan propil asetat dengan menggunakan reaktor ekuilibrium dapat dilihat pada Gambar 3 dan Gambar 4. Menurut Nada [6], penggunaan excess pada salah satu reaktan dapat meningkatkan konversi dari *limiting reactant*. Berdasarkan Gambar 3, dapat dilihat bahwa dengan penambahan dari *rasio feed flowrate*, konversi propanol untuk menghasilkan propil asetat semakin meningkat, walaupun peningkatan yang terjadi tidak terlalu signifikan. Berdasarkan Tabel 1, konversi propanol sebagai *limiting reactant* adalah melebihi 90%, dengan konversi tertinggi yang didapatkan pada simulasi adalah 99,96% dengan rasio mol umpan 1:10. Hal ini membuktikan bahwa propanol terkonversi secara maksimal menjadi propil asetat.

Tabel 1. Konversi propanol berdasarkan hasil simulasi dari reaktor ekuilibrium

Umpan (kmol/jam)		Produk (kmol/jam)		Konversi Propanol (%)
Propanol	Asam Asetat	Propanol	Asam Asetat	
10	10	0.9911	0.9911	90.0886
10	20	0.1169	10.1169	98.8314
10	30	0.0596	20.0596	99.4038
10	40	0.0400	30.0400	99.6003
10	50	0.0301	40.0300	99.6994
10	60	0.0241	50.0241	99.7592
10	70	0.0201	60.0201	99.7991
10	80	0.0172	70.0174	99.8277
10	90	0.0151	80.0151	99.8492
10	100	0.0134	90.0136	99.8659



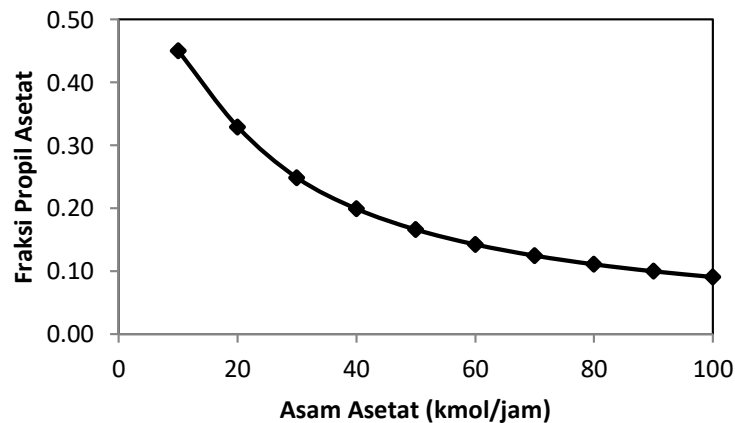
Gambar 3. Pengaruh *feed flowrate* terhadap konversi propanol

Kelemahan dari menggunakan asam asetat sebagai excess adalah sebagian besar dari asam asetat yang berlebih tidak bereaksi dan membutuhkan lebih banyak langkah untuk memisahkannya. Selain itu, penggunaan reaktan dalam jumlah besar juga meningkatkan biaya untuk pemisahan [3]. Berdasarkan Gambar 4, penambahan dari

dari *feed flowrate*, fraksi propil asetat yang dihasilkan semakin sedikit. Hal ini karena, sisa dari asam asetat yang tidak bereaksi semakin banyak juga. Menurut Huang [2], rasio mol umpan yang sama (1:1) menyebabkan komposisi kesetimbangan propil asetat yang tertinggi. Hal ini terjadi juga pada simulasi ini, pada rasio umpan 10 kmol propanol : 10 kmol asam asetat, fraksi propil asetat yang dihasilkan adalah 0,4504. Sehingga dari simulasi ini diketahui bahwa, *feed flowrate* 10 kmol propanol dan 10 kmol asam asetat menghasilkan komposisi propil asetat yang maksimal, walaupun tidak mencapai konversi yang maksimal. *Excess* asam asetat yang banyak akan menyebabkan pemisahan yang cukup susah dan membuang-buang bahan serta menghasilkan komposisi propil asetat yang sedikit.

Tabel 2. Konversi propanol berdasarkan hasil simulasi dari reaktor ekuilibrium

Umpan (kmol/jam)		Produk (kmol/jam)		Fraksi Propil
Propanol	Asam Asetat	Propil Asetat	Air	Asetat
10	10	9.0089	9.0089	0.4504
10	20	9.8831	9.8831	0.3294
10	30	9.9404	9.9404	0.2485
10	40	9.9600	9.9600	0.1992
10	50	9.9700	9.9700	0.1662
10	60	9.9761	9.9761	0.1425
10	70	9.9799	9.9799	0.1247
10	80	9.9826	9.9826	0.1109
10	90	9.9850	9.9850	0.0998
10	100	9.9866	9.9866	0.0908



Gambar 4. Pengaruh *feed flowrate* terhadap fraksi propil asetat yang dihasilkan

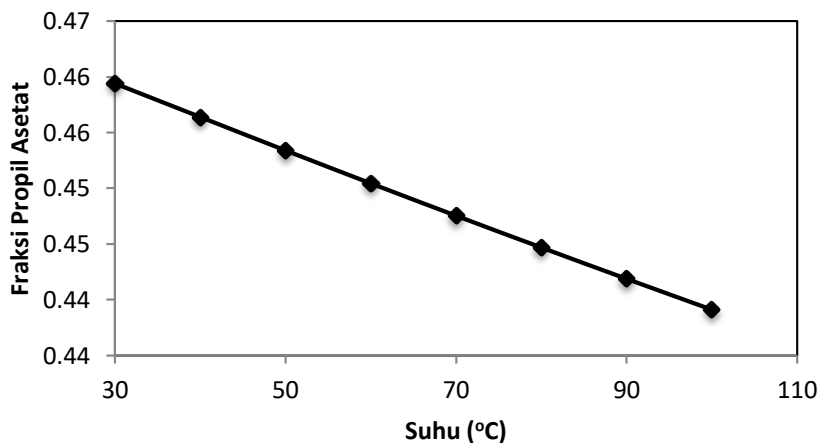
3.2. Pengaruh Suhu Operasi terhadap Pembentukan Propil Asetat

Proses esterifikasi bisa diklasifikasikan sebagai reaksi eksotermis dimana beberapa panas akan lepas ke lingkungan [7]. Menurut Le Chatelier, saat suhu dinaikkan pada reaksi eksotermis, posisi kesetimbangan akan bergerak untuk melawan perubahan. Itu artinya posisi keseimbangan akan bergerak sehingga suhu akan berkurang lagi. Hal ini menyebabkan, posisi kesetimbangan akan bergerak ke kiri, ke arah reaktan. Campuran kesetimbangan baru akan mengandung lebih banyak reaktan.

Berdasarkan Tabel 2 dan Gambar 5, diketahui bahwa semakin meningkatnya suhu, propil asetat yang dihasilkan semakin berkurang. Begitu juga dengan fraksi propil asetat yang semakin kenaikan suhu fraksinya berkurang. Hal ini sesuai dengan prinsip Le Chatelier yang menyebutkan bahwa pada reaksi eksotermis, penambahan suhu akan menggeser kesetimbangan ke arah reaktan bukan produk. Penambahan suhu akan menyukai reaksi endotermis dalam reaksi esterifikasi merupakan reaksi yang sebaliknya (*the reverse reaction*) karena endotermis membutuhkan energi atau menyerap panas yang ditambahkan. Sehingga akan membuat reaksi menggeser kesetimbangan ke arah reaktan.

Tabel 2. Konversi propanol berdasarkan hasil simulasi dari reaktor ekuilibrium

Suhu (°C)	Propil Asetat (kmol/jam)	Fraksi Propil Asetat
30	9.1889	0.4594
40	9.1279	0.4564
50	9.0678	0.4534
60	9.0088	0.4504
70	8.9508	0.4475
80	8.8937	0.4447
90	8.8376	0.4419
100	8.7822	0.4391



Gambar 5. Pengaruh suhu reaktor terhadap fraksi propil asetat

4. KESIMPULAN

Kenaikan pada perbandingan mol menghasilkan fraksi propil asetat yang semakin sedikit dan kenaikan suhu juga menghasilkan fraksi propil asetat yang semakin sedikit. Jadi, *feed flowrate* yang menghasilkan komposisi propil asetat terbaik adalah pada perbandingan 10 kmol/jam propanol : 10 kmol/jam asam asetat dengan suhu operasi 30°C.

REFERENSI

- [1] Wibowo, A.A., Lusiani, C.E., Ginting, R.R., dan Hartanto, D., 2018, *Simulasi ChemCAD : Studi Kasus Distilasi Ekstraktif pada Campuran Terner n-Propil Asetat/n-Propanol/Air*, Jurnal Teknik Kimia dan Lingkungan, Vol. 2, No. 2, 75-83
- [2] Huang, Y., and Sundmacher, K., 2007, *Kinetics Study of Propyl Acetate Synthesis Reaction Catalyzed by Amberlyst 15*, International Journal of Chemical Kinetics, Vol. 39, No. 05, 245-253.
- [3] Rathod, A., Wasewar, K., and Chang, K., 2014, *Enhancement of Esterification of Propionic Acid with Isopropyl Alcohol by Pervaporation Reactor*, Journal of Chemistry, Vol. 2014, 1-4.
- [4] Ronnback, R. dkk, 1997, *Development of a Kinetic Model for The Esterification of Acetic Acid with Methanol In The Presence of Homogeneous Acid Catalyst*, Chemical Engineering Science, Vol. 52, No. 19, 3369-3381
- [5] Chemstation.Inc., 2006, *Physical Properties Version 5.6 Users Guide*, Chemstation, Houston.
- [6] Nada, A., Maha, A., and Haider, A., 2010, *Kinetic Study of Esterification Reaction*, Al-Khwarizmi Engineering Journal, Vol. 6, No. 2, 33-42
- [7] Rahman, S., Bakar, M., and Ahmad, Z., 2010, *Preliminary Study of The Heat Release From Esterification Process*, International Journal of Engineering & Technology IJET-IJENS, Vol. 10, No. 3, 24-27.