

SIMULASI CHEMCAD: PENGARUH SUHU UMPAN DALAM PEMURNIAN ISOPROPIL ALKOHOL DENGAN DISTILASI EKSTRAKTIF

Mohammad Fariz Abidin dan Agung Ari Wibowo

Jurusan Teknik Kimia, Politeknik Negeri Malang, Jl. Soekarno Hatta No. 9, Malang, Indonesia

mohammadfarizabidin12@gmail.com, [agung.ari@polinema.ac.id]

ABSTRAK

Isopropil alkohol merupakan salah satu jenis alkohol yang dapat digunakan sebagai bahan baku dalam pembuatan *hand sanitizer* dengan kandungan bahan aktif 75-80% v/v. Distilasi konvensional tidak bisa dilakukan karena isopropil alkohol yang digunakan memiliki kemurnian yang rendah dan memerlukan proses pemurnian khusus karena memiliki titik azeotrop dengan air pada fraksi mol 0,68. Salah satu metode yang dapat digunakan ialah distilasi ekstraktif dengan *entrainer* gliserol. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh suhu umpan masuk isopropil alkohol terhadap beban *reboiler* dan beban *condenser*. Simulasi ini menggunakan *software* ChemCAD 7.1.2 dengan memanfaatkan fitur *sensitivity study* dengan memvariasikan suhu umpan masuk isopropil alkohol antara 25°C hingga 100°C dengan 15 step. Hasil yang didapatkan menunjukkan suhu umpan masuk isopropil alkohol terbaik ialah pada suhu 80°C dengan beban *reboiler* sebesar 339.491 kJ/jam. Beban *condenser* cenderung konstan pada -378.735 kJ/jam dan tidak terpengaruh oleh variasi suhu umpan masuk isopropil alkohol.

Kata kunci: ChemCAD 7.1.2, distilasi ekstraktif, gliserol, isopropil alkohol

ABSTRACT

Isopropyl alcohol is one type of alcohol that can be used as a raw material in manufacturing of hand sanitizer with an active ingredient content of 75-80% v/v. Conventional distillation can not be carried out because the isopropyl alcohol used has a low purity and requires a special purification process because it has an azeotropic point with water at a mole fraction of 0,68. One of the method that can be used is extractive distillation with glycerol entrainer. This study aims to determine the effect of isopropyl alcohol feed temperature on the reboiler load and the condenser load. This simulation uses ChemCAD 7.1.2 software by utilizing the sensitivity study feature by varying the feed temperature of isopropyl alcohol between 25°C to 100°C with 15 steps. The result obtained indicate that the best isopropyl alcohol feed temperature is at a temperature of 80°C with a reboiler load of 339.491 kJ/h. Condenser load tends to be constant at -378.735 kJ/h and it is not affected by variations of the isopropyl alcohol feed temperature.

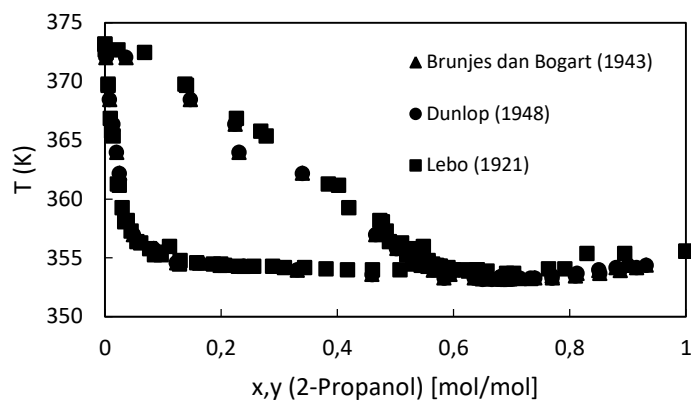
Keywords: ChemCAD 7.1.2, extractive distillation, glycerol, isopropyl alcohol

1. PENDAHULUAN

Isopropil alkohol merupakan salah satu jenis alkohol yang dapat digunakan sebagai bahan baku utama dalam pembuatan *hand sanitizer*. Isopropil alkohol digunakan karena dapat membunuh mikroba dengan mekanisme perusakan protein pada membran plasma. Berdasarkan rekomendasi WHO pada studi literatur Jing, dkk. (2020), formula *hand sanitizer*

dari isopropil alkohol yang efektif dalam membunuh mikroba maupun virus ialah memiliki kandungan bahan aktif sebesar 75-80% v/v [1]. Kelebihan Isopropil alkohol jika dibandingkan dengan alkohol jenis lain seperti etanol dalam pembuatan *hand sanitizer* ialah lebih aman untuk permukaan kulit manusia [2].

Dalam pembuatan *hand sanitizer* berskala industri, umumnya bahan baku isopropil alkohol yang digunakan memiliki kemurnian yang rendah untuk menghemat biaya produksi. Isopropil alkohol yang masih memiliki banyak pengotor memerlukan proses pemurnian untuk memisahkannya dari air sebelum digunakan [3,4]. Berdasarkan data kesetimbangan uap-cair dari percobaan Brunjes dan Bogart (1943), Dunlop (1948), dan Lebo (1921) pada situs Dortmund Data Bank, campuran isopropil alkohol dengan air memiliki titik azeotrop pada fraksi mol 0,68 yang mana tidak dapat dipisahkan menggunakan distilasi konvensional sehingga diperlukan proses pemurnian khusus seperti distilasi ekstraktif untuk meningkatkan kemurniannya [5–8].



Gambar 1. Data VLE untuk isopropil alkohol (2-propanol)/air pada tekanan 101,325 kPa [5]

Distilasi ekstraktif merupakan salah satu metode pemisahan yang digunakan untuk beberapa jenis komponen dengan beda titik didih yang berdekatan dengan bantuan *entrainer* atau agen pemisah *non-volatile* yang mampu menggeser volatilitas relatif dari komponen [9]. *Entrainer* yang digunakan pada metode pemisahan ini berguna untuk memecah titik azeotrop pada campuran isopropil alkohol/air. Berdasarkan simulasi yang dilakukan oleh Hartanto, dkk. (2019), pada pemisahan campuran isopropil alkohol/air menggunakan *entrainer* gliserol yang merupakan produk samping dari pembuatan biodiesel sehingga berkelanjutan, tidak mencemari lingkungan, dan biayanya terjangkau [3]. Pada penelitian Wibowo, dkk. (2020), teknologi produksi biodiesel terbaru bisa tidak menghasilkan gliserol dengan teknologi *greendiesel* yang menghasilkan *byproduct* mirip dengan *fuel gas* seperti metana, etana, dan propana [10]. *Entrainer* gliserol dipilih karena pada proses pembuatan *hand sanitizer* juga membutuhkan gliserol sebanyak 7,5 ml per 1000 mL produk sebagai campurannya sehingga proses tidak menghasilkan limbah [1].

Berdasarkan penelitian Zhang, dkk. (2014), penggunaan gliserol untuk memurnikan isopropil alkohol dari air yang dibutuhkan minimal fraksi molnya ialah sekitar 0,229 [11]. Pada simulasi yang dilakukan Rodriguez dan Kroon (2015) dan Zhu, dkk. (2016), model *Non Random Two Liquid* (NRTL) digunakan sebagai model yang sesuai dengan sistem isopropil

alkohol/air [12,13]. Pada penelitian yang dilakukan oleh Gil, dkk. (2014), Gil melakukan model NRTL dalam simulasi untuk memisahkan etanol menggunakan metode distilasi ekstraktif dengan *entrainer* glikol dan menyimpulkan bahwa pengaruh suhu umpan masuk dapat menurunkan beban *reboiler* namun tidak berpengaruh terhadap beban *condenser* [14].

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh suhu umpan masuk isopropil alkohol terhadap beban *reboiler* dan beban *condenser* pada distilasi ekstraktif dengan *entrainer* gliserol menggunakan *software* ChemCAD 7.1.2. Sehingga dari hasil penelitian ini dapat digunakan sebagai dasar simulasi pada proses pemurnian isopropil alkohol.

2. METODOLOGI PENELITIAN

Pada penelitian ini proses pemurnian isopropil alkohol disimulasikan dengan menggunakan *software* ChemCAD 7.1.2. Alat distilasi untuk proses pemurnian isopropil alkohol pada simulasi ini yaitu menggunakan jenis kolom distilasi SCDS dan untuk menentukan suhu umpan masuk terbaik terhadap beban *reboiler* maupun *condenser* dengan menggunakan fitur *sensitivity study* pada *software* ChemCAD 7.1.2.

2.1. Model Termodinamika

Model kesetimbangan uap-cair yang digunakan ialah model NRTL [12,13]. Persamaan NRTL yang digunakan oleh *software* ChemCAD 7.1.2 ialah sebagai berikut:

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j^N \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_l^N G_{li} x_l} + \sum_j^N \frac{x_j G_{ij}}{\sum_l^N G_{lj} x_l} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_l^N x_l \tau_{il} G_{lj}}{\sum_l^N G_{lj} x_l} \right) \quad (1)$$

dimana:

$$\tau_{ji} = A_{ji} + \frac{B_{ji}}{T} + C_{ji} * \ln(T) + D_{ji} * T \quad (2)$$

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ji} * \tau_{ji}) \quad (3)$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ji} \quad (4)$$

T = Suhu (dalam Kelvin)

Nilai Parameter Interaksi Biner (BIP) diperoleh dari *database* pada *software* ChemCAD 7.1.2 yang dapat dilihat pada Tabel 1.

Tabel 1. Parameter Interaksi Biner (BIP) dari beberapa komponen yang terlibat dalam proses pemurnian isopropil alkohol dalam simulasi ChemCAD

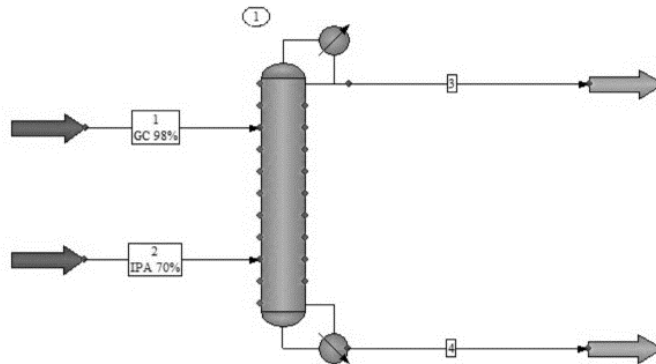
Komponen 1	Komponen 2	B_{ij}^*	B_{ji}^*	α^*
Isopropil alkohol	Air	20,0554	832,981	0,3255
Gliserol	Air	-274,348	258,114	1,0106

*tersedia dalam *database* pada *software* ChemCAD 7.1.2

2.2. Deskripsi Proses

Simulasi proses pada penelitian ini dapat dilihat pada Gambar 2. Alat distilasi yang digunakan yaitu jenis kolom distilasi SCDS. Komposisi umpan yang digunakan ialah sebesar 0,229 fraksi mol untuk gliserol dan 0,771 fraksi mol untuk isopropil alkohol [11]. Neraca massa total pada kolom distilasi dapat dilihat pada Tabel 2. Laju alir umpan adalah gliserol 98% v/v (35,1372 kg/jam) dan isopropil alkohol 70% v/v (45,0807 kg/jam).

Masing-masing aliran umpan dikondisikan pada suhu 25°C dan tekanan 101,3 kPa. Jumlah *stage* pada kolom distilasi ialah 17 dengan gliserol masuk pada *stage* 9 dan isopropil alkohol masuk pada *stage* 11.

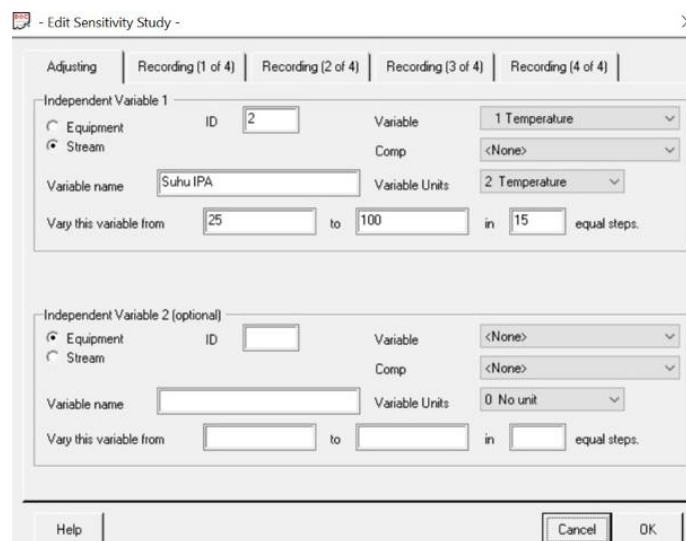


Gambar 2. Simulasi distilasi ekstraktif pada proses pemurnian isopropil alkohol

Tabel 2. Neraca massa total pada kolom distilasi

Komponen	Laju alir massa <i>input</i> (kg/jam)		Laju alir massa <i>output</i> (kg/jam)	
	1	2	3	4
Isopropil alkohol	0	29,1736	29,1736	0
Gliserol	34,5727	0	0	34,5727
Air	0,5600	15,9071	9,2791	7,1879
Jumlah	35,1327	45,0807	38,4528	41,7606
Total laju massa	80,2134		80,2134	

Suhu umpan masuk isopropil alkohol divariasikan dari 25°C hingga 100°C dengan 15 step menggunakan fitur *sensitivity study* pada *software* ChemCAD 7.1.2. Fitur ini selanjutnya digunakan untuk mengetahui pengaruh suhu umpan masuk isopropil alkohol terhadap beban *reboiler* dan *condenser*.



Gambar 3. Pengaturan fitur *sensitivity study* pada *software* ChemCAD 7.1.2

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Campuran isopropil alkohol/air memiliki titik azeotrop yang saling berdekatan dan hanya dapat dipisahkan menggunakan metode tertentu seperti distilasi ekstraktif. Distilasi ekstraktif merupakan salah satu metode pemurnian yang dapat mengubah relatif volatilitas komponen dengan bantuan *entrainer* atau agen pemisah *non-volatile*. Hasil simulasi pemurnian isopropil alkohol dengan distilasi ekstraktif menggunakan *software* ChemCAD 7.1.2 dapat dilihat pada Tabel 3.

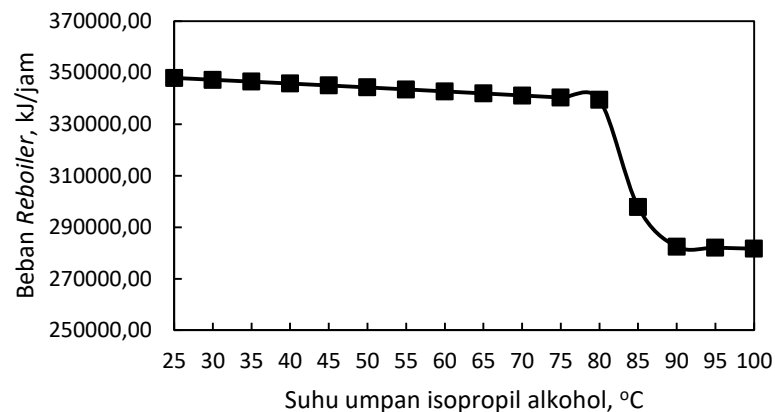
Tabel 3. Hasil simulasi pengaruh suhu umpan isopropil alkohol terhadap beban *reboiler* dan beban *condenser* menggunakan *software* ChemCAD 7.1.2

Suhu (°C)	Beban <i>Reboiler</i> (kJ/jam)	Beban <i>Condenser</i> (kJ/jam)
25	347931,00	-328736,00
30	347215,00	-328737,00
35	346487,00	-328735,00
40	345751,00	-328735,00
45	345004,00	-328736,00
50	344248,00	-328737,00
55	343483,00	-328736,00
60	342704,00	-328736,00
65	341917,00	-328736,00
70	341119,00	-328736,00
75	340311,00	-328736,00
80	339491,00	-328735,00
85	297874,00	-328735,00
90	282454,00	-328736,00
95	282052,00	-328736,00
100	281645,00	-328737,00

3.1. Pengaruh suhu umpan isopropil alkohol terhadap beban *reboiler*

Menurut Gil (2014), pemanasan awal umpan mampu menurunkan konsumsi energi *reboiler* hingga 10% [14]. Gambar 4 menunjukkan bahwa beban *reboiler* akan semakin turun ketika suhu umpan semakin tinggi yaitu dari 347.931 kJ/jam pada suhu 25°C menjadi 339.491 kJ/jam pada suhu 80°C. Meskipun pemanasan awal umpan dapat meningkatkan biaya proses, hal tersebut dapat dipertimbangkan untuk menggunakan jaringan penukar panas yang terintegrasi pada sistem. Dengan adanya penukar panas terintegrasi, maka kalor yang diperlukan pada pemanasan awal umpan mampu disediakan tanpa harus menambah biaya operasional.

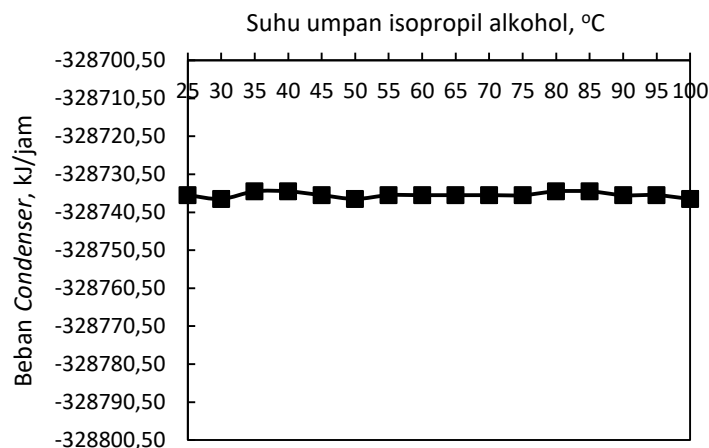
Suhu umpan yang terlalu tinggi juga harus diperhatikan karena dapat mempengaruhi kualitas pemurnian. Suhu umpan yang terlalu tinggi dapat menyebabkan penguapan air pada campuran isopropil alkohol/air sehingga tidak terjadi pemurnian seperti yang diinginkan. Pada beberapa literatur menggunakan suhu titik azeotrop sebagai suhu awal umpan [15,16]. Penggunaan suhu umpan azeotropik terbaik untuk menurunkan beban *reboiler* berada disekitar titik didih isopropil alkohol (82,5°C) yaitu sekitar 80°C.



Gambar 4. Pengaruh suhu umpan isopropil alkohol terhadap beban *reboiler*

3.2. Pengaruh suhu umpan isopropil alkohol terhadap beban *reboiler*

Pada Gambar 5, beban *condenser* tetap konstan sekitar -328.735 kJ/jam untuk seluruh rentang suhu yang mana sesuai dengan simulasi pada literatur [14]. Hal tersebut dikarenakan beban *condenser* dipengaruhi oleh laju alir umpan. Semakin tinggi laju alir umpan, maka beban *condenser* akan semakin besar.



Gambar 5. Pengaruh suhu umpan isopropil alkohol terhadap beban *condenser*

4. KESIMPULAN DAN SARAN

Berdasarkan simulasi yang telah dilakukan, suhu umpan isopropil alkohol terbaik untuk menurunkan beban *reboiler* ialah menggunakan suhu 80°C dengan besar beban *reboiler* adalah 339.491 kJ/jam. Beban *condenser* terhadap suhu umpan isopropil alkohol cenderung konstan pada -328.735 kJ/jam. Hal itu menunjukkan bahwa variasi suhu umpan isopropil alkohol tidak mempengaruhi beban kondensor.

Kebutuhan energi pada proses pemurnian isopropil alkohol dapat mempertimbangkan penggunaan jaringan penukar panas yang terintegrasi pada sistem. Dengan melakukan pengembangan terhadap jaringan penukar panas yang terintegrasi, kebutuhan energi dapat terpenuhi secara efisien tanpa harus menambah biaya operasional.

REFERENSI

- [1] Jing, J. L., Yi, T. P., Bose, R. J. C., McCarthy, J. R., Tharmalingam, N., dan Madheswaran, T., 2020, *Hand Sanitizers: A Review on Formulation Aspects, Adverse Effects, and Regulations*, Int. J. Environ. Res. Public Health, Vol. 17, No. 9, 3326.
- [2] Jokar, A., dan Mohebbi, Z., 2011, *Comparing The Efficacy of Alcohol Isopropyl and Ethanol on The Reduction of Contamination of Medical Check-Up Devices in Children Ward and Neonatal Intensive Care Unit (NICU)*, Int. Res. J. Pharm. Pharmacol., Vol. 1, No. 5, 75-78.
- [3] Hartanto, D., Handayani, P. A., Sutrisno, A., Anugrahani, V. W., Mustain, A., dan Khoiroh, I., 2019, *Isopropyl Alcohol Purification through Extractive Distillation using Glycerol as an Entrainer: Technical Performances Simulation and Design*, Jurnal Bahan Alam Terbarukan, Vol. 8, No. 2, 133–143.
- [4] Silviana, S., dan Purbasari, A., 2008, *Pengambilan Air dari Sistem Isopropil Alkohol – Air dengan Distilasi Adsorptif Menggunakan Zeolit Alam dan Silika Gel*, Reaktor, Vol. 12, No. 1, 29-34.
- [5] Brunjes, A. S., dan Bogart, M. J. P., 1943, *The Binary Systems Ethanol-n-Butanol, Acetone-Water and Isopropanol-Water*, Ind.Eng.Chem., No. 35, 255–260.
- [6] Dunlop, J. G., 1948, *Vapor-Liquid Equilibrium Data*, Master's Thesis, Brooklyn Polytechnic Institute.
- [7] Lebo, R. B., 1921, *Properties of Mixtures of Isopropyl Alcohol and Water*, J.Am.Chem.Soc., No. 43, 1005–1011.
- [8] Bank, D. D., 2012, *Vapor-Liquid Equilibrium Data*, DDBST GmbH, 2012.
- [9] 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*, J. Tek. Kim. dan Lingkung., Vol. 2, No. 2, 75-83.
- [10] Wibowo, A. A., Mustain, A., Lusiani, C. E., Hartanto, D., dan Ginting, R. R., 2020, *Green Diesel Production from Waste Vegetable Oil : A Simulation Study*, in AIP Conference Proceedings, Vol. 2223, No. 020008, 1–6.
- [11] Zhang, L., Zhang, W., dan Yang, B., 2014, *Experimental Measurement and Modeling of Ternary Vapor–Liquid Equilibrium for Water + 2-Propanol + Glycerol*, J. Chem. Eng. Data, Vol. 59, No. 11, 3825–3830.
- [12] Rodriguez, N. R. dan Kroon, M. C., 2015, *Isopropanol Dehydration via Extractive Distillation using Low Transition Temperature Mixtures as Entrainers*, J. Chem. Thermodyn., Vol. 85, 216–221.
- [13] Zhu, X. M., Wang, X. C., Wang, W. L., dan Zhang, L. Z., 2016, *Simulation of Isopropanol Dehydration via Extractive Distillation using Glycerol as Entrainer*, Vol. 36, 189–192.
- [14] Gil, I. D., García, L. C., dan Rodríguez, G., 2014, *Simulation of Ethanol Extractive Distillation with Mixed Glycols as Separating Agent*, Brazilian J. Chem. Eng., Vol. 31, No. 1, 259–270.
- [15] Meirelles, A., Weiss, S., dan Herfurth, H., 2007, *Ethanol Dehydration by Extractive Distillation*, J. Chem. Technol. Biotechnol., Vol. 53, 181–188.
- [16] Chianese, A., dan Zinamosca, F., 1990, *Ethanol Dehydration by Azeotropic Distillation with a Mixed-Solvent Entrainer*, Chem. Eng. J., Vol. 43, No. 2, 59–65.