

## POSTULASI MEKANISME REAKSI MENGGUNAKAN METODA LANGMUIR-HINSHELWOOD PADA OKSIDASI ETANOL MENJADI ASETALDEHIDA DENGAN KATALIS PERAK

**Leily Nurul Komariah**

**Jurusan Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Sriwijaya  
Jl. Raya Prabumulih KM 32 Inderalaya OI Sumatera Selatan**

*Penentuan/postulasi mekanisme reaksi merupakan salah satu rangkaian dalam studi kinetika reaksi yang sangat penting dan mempengaruhi keberhasilan studi. Postulasi mekanisme disusun dan diarahkan untuk membangun model persamaan laju reaksi hingga diperolehnya parameter kinetika yang teruji secara termodinamika dan konsisten secara statistik. Model persamaan kinetika diturunkan berdasarkan teori Langmuir-Hinshelwood dan dirumuskan dengan formulasi Hougen-Watson dan menggunakan metode laju pengendali reaksi (dalam hal ini tahapan reaksi permukaan) untuk menetapkan mekanisme reaksi yang representatif.*

*Proses berlangsung pada rentang temperatur 475-550 °C yang secara termodinamika mengakomodir berlangsungnya kedua jalur reaksi tersebut. Produk utama reaksi ini adalah asetaldehida, dietil eter dan produk samping CO<sub>2</sub>. Secara umum reaksi kompleks proses konversi etanol menjadi asetaldehida dengan katalis perak dirumuskan dimana tahap reaksi permukaan di masing-masing reaksi utama merupakan tahap pengendali reaksi, dan persamaan laju diturunkan secara empiris dari reaksi samping dianggap berlangsung non katalitik.*

**Kata Kunci :** formulasi Hougen Watson, konversi etanol, Langmuir-Hinshelwood, postulasi mekanisme reaksi, reaksi permukaan

### I. PENDAHULUAN

Oksidasi Etanol umumnya menghasilkan asetaldehida. Sebagai senyawa kimia antara yang cukup populer, asetaldehida berperan penting, utamanya sebagai bahan baku industri pembuatan asam asetat, asetat anhidrat, etil asetat, pentaerithritol dan lain-lain. Hampir sebagian besar proses konversi hidrokarbon menjadi asam asetat, asam perasetat, ketin, dan lain-lain akan membentuk asetaldehida sebagai zat antara.

Seperti umumnya studi kinetika reaksi, penelitian dilangsungkan dengan melibatkan aktivitas eksperimental dan pemodelan sekaligus yang dilakukan secara sinergis. Penentuan/postulasi mekanisme reaksi merupakan salah satu rangkaian dalam studi kinetika reaksi yang sangat penting, mempengaruhi keberhasilan studi. Postulasi mekanisme yang disusun diarahkan untuk membangun model persamaan laju reaksi sampai diperolehnya parameter kinetika yang teruji secara termodinamika dan konsisten secara statistik.

Sekalipun teknologi komputasi mempermudah upaya melakukan pemodelan menguji ketepatan postulasi mekanisme yang diajukan, namun postulasi mekanisme yang mendekati kondisi reaksi yang sebenarnya -

berdasarkan teori-teori dan pengujian eksperimental-, sangat penting di investigasi lebih lanjut.

Reaksi oksidasi etanol berbasis katalis perak dilangsungkan pada temperatur 475 – 550 °C pada reaktor isothermal. Konsumsi energi dan reaktan serta pemakaian katalis yang efisien sangat dibutuhkan, sbeelum dilanjutkan pada tahapan pemodelan dan simulasi. Pendekatan yang lebih akurat dalam mempostulasi mekanisme reaksi akan membuat penelitian menjadi lebih antisipatif terhadap resiko-resiko kesalahan dalam eksperimen sehingga kegiatan eksperimental dapat lebih efisien dan ekonomis.

Oksidasi etanol menjadi asetaldehida dengan menggunakan katalis perak berlangsung dengan mengikuti dua jalur utama rekasi yaitu oksidasi dan dehidrogenasi etanol, dan pada kondisi tertentu memungkinkan terjadinya dehidrasi etanol menjadi dietil eter secara non katalitik. Reaksi kompleks -terlebih bila secara eksperimental menunjukkan fakta-fakta yang menarik – selalu memerlukan dukungan penjelasan terperinci terhadap masing-masing tahapan mekanistik yang

terjadi dalam proses ini. Penjelasan tersebut tidak cukup pada pembuktian simulatif model persamaan laju terhadap postulasi mekanisme reaksi saja, namun juga teruji logis secara ilmiah sesuai teori dasar mekanisme reaksi, dan konsisten secara termodinamika dan statistika.

## 2. FUNDAMENTAL

Mekanisme reaksi kimia merupakan gambaran mikroskopis dari suatu reaksi yang terdiri dari berbagai reaksi elementer. Prinsip dasarnya adalah apakah laju reaksi elementer tersebut proporsional dengan frekuensi tumbukan molekul yang ditunjukkan oleh persamaan stoikiometrik yang mekanistik, contohnya konsentrasi produk menunjukkan molekularitas reaksi.

### Reaksi Katalitik Heterogen berdasarkan Teori Langmuir-Hinshelwood

Peristiwa adsorpsi pada permukaan padatan merupakan proses yang kompleks. Sebagian besar permukaan katalis heterogen tidak seragam. Perbedaan energi, struktur kristal dan komposisi kimia akan terjadi pada saat salah satunya berubah di permukaan katalis.

Peristiwa reaksi pada katalis heterogen umumnya melalui tahapan-tahapan berikut ini [Hougen dan Watson, 1990] :

- ① Perpindahan massa reaktan di luar partikel katalis
- ② Perpindahan massa reaktan ke dalam pori
- ③ Adsorpsi reaktan pada permukaan katalis
- ④ Reaksi di permukaan
- ⑤ Desorpsi produk dari permukaan katalis
- ⑥ Perpindahan massa produk di dalam pori
- ⑦ Perpindahan massa produk ke luar partikel katalis

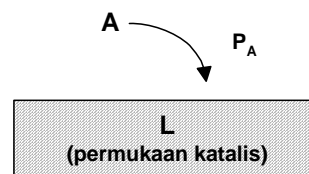
Pada dasarnya laju setiap tahap di atas bergantung pada sejumlah faktor selain faktor profil konsentrasi reaktan dan produk. Tahap pertama dan ketujuh sangat bergantung kepada karakteristik aliran fluida dalam sistem. Kecepatan massa aliran fluida, ukuran partikel, dan karakteristik difusi dari berbagai jenis molekuler adalah parameter yang berhubungan dengan laju dari tahap tersebut di atas. Tahapan di atas membatasi laju yang teramati hanya saat reaksi berjalan sangat cepat dan pindah massa berjalan lambat. Segala sesuatu yang cenderung meningkatkan koefisien pindah massa akan memperbesar laju reaksi tahapan proses tersebut di atas.

Dasar studi aspek kinetika reaksi heterogen adalah isoterm adsorpsi. Beberapa isoterm adsorpsi yang terkenal adalah isoterm Langmuir dan isoterm Freundlich. Isoterm Langmuir merupakan isoterm

adsorpsi yang paling banyak digunakan pada studi-studi aspek kinetika reaksi heterogen. Asumsi-asumsi yang digunakan pada isoterm Langmuir adalah [Smith, 1981]:

1. Semua permukaan katalis mempunyai keaktifan adsorpsi yang sama (mempunyai energi adsorpsi yang seragam)
2. Setiap pusat aktif hanya dapat mengakomodasi satu spesies
3. Tidak ada interaksi antara molekul teradsorpsi, yang berarti bahwa jumlah molekul teradsorpsi tidak akan mempengaruhi laju reaksi pada setiap pusat aktif katalis
4. Semua peristiwa adsorpsi terjadi dengan mekanisme yang sama dan setiap kompleks teradsorpsi mempunyai struktur yang sama
5. Spesies yang teradsorpsi pada permukaan katalis terikat pada lokasi tertentu membentuk lapisan tunggal (monolayer)

Contoh dapat diperhatikan melalui peristiwa adsorpsi reaktan A pada permukaan katalis logam seperti yang terlihat pada Gambar 1.



Peristiwa adsorpsi di atas dapat ditulis sebagai berikut:

$$A + L \rightleftharpoons A \cdot L$$

Jika dinyatakan sebagai persamaan laju (kinetika) reaksi maka:

$$\text{Laju adsorpsi (laju reaksi ke kanan)} = (dn_A/dt)_{\text{ads}} = k_1 P_A \theta = k_1 P_A (1 - \theta_A) \dots (1)$$

$$\text{Laju desorpsi (laju reaksi ke kiri)} = (dn_A/dt)_{\text{des}} = k_2 \theta_A \dots (2)$$

dimana:

$\theta_A$  = fraksi permukaan katalis yang ditempati oleh A

$\theta$  = fraksi kosong permukaan katalis

$$\theta + \theta_A = 1$$

Pada keadaan kesetimbangan :

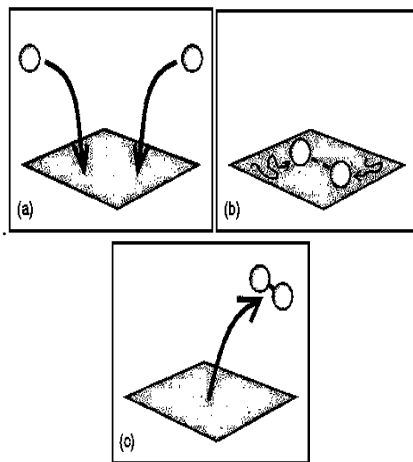
$$(dn_A/dt)_{\text{adsorpsi}} = (dn_A/dt)_{\text{desorpsi}}$$

Dengan demikian dapat dibuat hubungan dari persamaan 1 dan 2:

$$\theta_A = \frac{K \cdot P_A}{1 + K \cdot P_A}; \text{ dimana } K = \frac{k_1}{k_2}$$

Mekanisme Langmuir-Hinshelwood berdasarkan formulasi Hougen-Watson,

umumnya dapat divisualisasikan sesuai Gambar 2



**Gambar 2. Mekanisme Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson**

(a) dua molekul teradsorb pada permukaan katalis, (b) difusi permukaan dan berinteraksi pada saat posisi berdekatan, (c) molekul produk terbentuk, kemudian terdesorpsi

#### Proses Berbasis Katalis Perak

Proses konversi etanol menjadi asetaldehida yang dilakukan menggunakan katalis perak akan memungkinkan terjadinya dua jalur reaksi spesifik, yaitu jalur oksidatif dan non oksidatif. Seperti halnya pada proses komersial pembentukan formaldehida dari uap metanol dan udara, diketahui bahwa oksidasi etanol secara umum mengandung mekanisasi dasar yang terdiri dari kombinasi dua reaksi yang oksidasi dan dehidrogenasi (Twigg, 1989).

Kontribusi yang diberikan oleh kedua jalur reaksi tersebut tergantung pada jenis katalis yang digunakan dan kondisi proses. Katalis perak yang digunakan dalam proses ini dapat dalam berbagai formasi dan ukuran, seperti lempengan, koloid, kristalin maupun gauzed (sepuhan) pada material inert.

Berbagai rangkuman studi dilakukan peneliti sebelumnya menunjukkan aspek mekanistik terhadap reaksi katalitik berbasis katalis perak berlaku umum pada alkohol ringan seperti methanol dan etanol. Proses konversi yang terjadi dalam dua jalur reaksi yaitu oksidatif dan non oksidatif (dehidrogenasi) adalah dua tahap yang tidak saling bergantung. Jalur oksidatif bukan merupakan kombinasi sederhana dari dehidrogenasi alcohol yang diikuti dengan oksidasi hydrogen. Pada temperature rendah, jalur non oksidatif konversi etanol, asetaldehida hanya dapat terbentuk bila oksigen berada pada katalis perak. [Kung, Smith, 1994]

Persamaan yang dideduksi peneliti sebelumnya seperti Filho, Choudhuri dan rekan-rekan, berbasis pada ke-49 postulasi mekanisme tersebut disederhanakan dengan pendekatan laju reaksi awal, sehingga menjadi 27 persamaan laju

yang berbeda. Hal ini menunjukkan bahwa studi kinetika yang melibatkan postulasi mekanisme membutuhkan intuisi dan kesabaran yang tinggi untuk terus mencoba dan mengulang prosedur pemodelan.

### 3. METODOLOGI

Tahapan penelitian dilangsungkan dalam dua keompok pengerjaan yaitu ekperimental di laboratorium dan pemodelan dan simulasi dengan menggunakan teknik komputasi, dalam hal ini software Matlab.

Percobaan pendahuluan penting dilaksanakan untuk menguji ketepatan postulasi eksistensi masing-masing reaksi elementer secara umum dan lebih khusus setelah dilakukan penelitian utama dan memperoleh data eksperimental.

#### Langkah-langkah pengerjaan meliputi

##### 1. Tahap percobaan pendahuluan

Tahapan ini terdiri dari aktivitas preparasi katalis, penentuan kondisi proses awal, penetapan variabel proses, kalibrasi peralatan dan analisis standar (identifikasi produk utama dan samping).

Katalis yang dipilih adalah perak dalam bentuk sepuhan diatas kawat kasa aluminium. Kawat kasa aluminium dicuci lapisan lemaknya menggunakan MC 101 AP pada temperatur 55°C selama 1-2 menit. Selanjutnya dilakukan pencucian dengan asam sulfat 40%-vol pada temperatur kamar selama 5 detik.

Kawat dilapis terlebih dahulu menggunakan seng (proses zincate) dengan campuran larutan NaOH, ZnO, FeCl<sub>3</sub> dan NaK(C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>6</sub>), pada temperatur kamar selama 30 detik. Proses selanjutnya adalah pelapisan dengan tembaga menggunakan campuran larutan CuCN, NaCN, Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, dan NaK(C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>6</sub>) pada temperatur 50°C selama 15 menit. Proses yang terakhir adalah melapis kawat kasa menggunakan perak dengan campuran larutan AgCN, KCN, dan K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> pada suhu kamar selama 5-10 detik.

##### 2. Percobaan Utama

Eksperimen diselenggarakan dalam rangkaian peralatan seperti pada Gambar 3, yang dibagi menjadi tiga bagian utama yaitu bagian pengumpanan, reaksi dan pemisahan produk. Bagian pengumpanan dibagi lagi menjadi 2 (dua) bagian yaitu umpan liquid dan gas. Etanol diumpankan dalam reaktor dengan menggunakan syringe pump dalam jumlah volume yang kecil dan diset konstan. Gas umpan yang digunakan adalah gas oksigen murni dan nitrogen murni (high purity). Dua buah keran dipasang untuk mengatur laju alir masing-masing gas dan dimonitor melalui

rotameter. Untuk mensimulasi komposisi udara, oksigen dan nitrogen di campur dalam proporsi standar. Campuran gas dipanaskan menggunakan electrical heater wire sampai pada temperatur 65-75 °C. Selanjutnya campuran gas dan etanol di uapkan dalam evaporator dan keluar dalam temperatur sekitar 175 °C sebelum diumpankan ke reaktor.

Bagian reaksi, terdiri dari reaktor kolom tubular dengan panjang 25 cm dan diameter 2,5 cm. Reaktor ini diletakkan dalam furnace yang temperatur pemansannya dikendalikan oleh thermolyne. Pengukuran temperatur bed katalis dilakukan dengan menggunakan thermocouple yang dipasang aksial sepanjang reaktor. Reaktor dioperasikan downward satu pass

### 3. Analisis

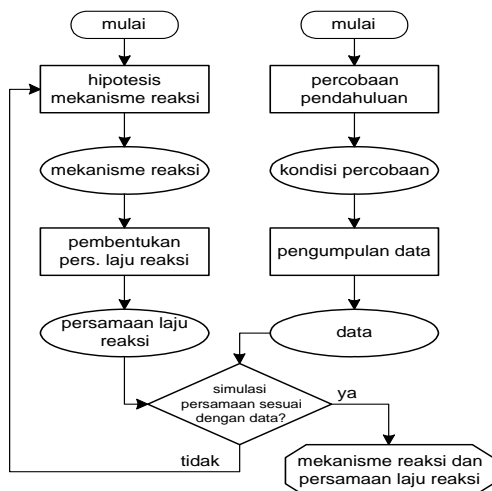
Komposisi produk (sampel) yang dihasilkan kemudian di analisa dengan menggunakan gas chromatography.

### 4. Postulasi Mekanisme Reaksi

Kegiatan postulasi mekanisme reaksi dilakukan secara trial and error teoritis dan praktis, dengan konfrontasi terhadap data eksperimen hasil identifikasi masing-masing komponen yang terlibat dalam reaksi elementer. Kegiatan analisis menggunakan gas Chromatography secara detail, untuk menguji eksistensi komponen tertentu dalam setiap tahapan reaksi elementer.

### 5. Pengujian Postulasi Mekanisme Reaksi

Aktivitas membuktikan ketepatan postulasi mekanisme reaksi dilakukan mengikuti algoritma seperti pada Gambar 7. Pembangunan model kinetika reaksi dilakukan melalui tahapan awal yaitu mempostulasikan mekanisme reaksi yang lebih bersifat deduktif ketimbang pemikiran induktif. Postulasi mekanisme reaksi dilakukan sesuai teori yang ada yang kemudian akan menghasilkan model persamaan kinetika kompleks yang akan diuji kecocokannya dengan data eksperimental.

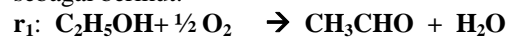


Gambar 4. Algoritma Kegiatan Pemodelan dan Pengujian Postulasi Mekanisme Reaksi

## 4. HASIL DAN PEMBAHASAN

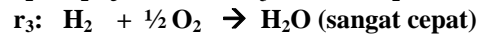
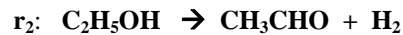
Proses konversi etanol menjadi asetaldehida dengan katalis perak dalam penelitian ini dipostulasikan berlangsung melalui empat reaksi utama pada unggun katalis (reaksi katalitik) dan satu reaksi non katalitik. Reaksi katalitik terdiri dari oksidasi etanol menjadi asetaldehida dan air, dehidrogenasi etanol membentuk asetaldehida dan hidrogen, reaksi oksidasi hidrogen (pembentukan molekul air). Sementara reaksi non katalitik merupakan reaksi dehidrasi etanol menjadi dietil eter.

Formulasi Hougen-Watson menggunakan teori Langmuir-Hinshelwood dalam menurunkan persamaan kinetika reaksi, dimulai dengan dugaan mekanisme reaksi sebagai berikut:



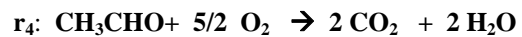
Mekanisme :

- (i).  $\frac{1}{2} O_2 + \theta \rightleftharpoons \theta O$
- (ii).  $C_2H_5OH + \theta O \rightleftharpoons \theta .CH_3CHO + \theta .H_2O$
- (iii).  $\theta .CH_3CHO \rightleftharpoons CH_3CHO + \theta$
- (iv).  $\theta .H_2O \rightleftharpoons H_2O + \theta$



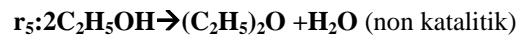
Mekanisme :

- (i).  $\frac{1}{2} O_2 + \theta \rightleftharpoons \theta O$
- (ii).  $C_2H_5OH + \theta \rightleftharpoons \theta .CH_3CH + \theta .H_2$
- (iii).  $\theta .CH_3CHO \rightleftharpoons CH_3CHO + \theta$
- (iv).  $\theta .H_2 + \theta O \rightleftharpoons \theta H_2O + \theta$
- (v).  $\theta .H_2O \rightleftharpoons H_2O + \theta$



Mekanisme :

- (i).  $CH_3CHO + \theta \rightleftharpoons \theta .CH_3CHO$
- (ii).  $\frac{5}{2} O_2 + \theta \rightleftharpoons 5 \theta .O$
- (iii).  $\theta .CH_3CHO + \theta .O \rightleftharpoons \theta .CO_2 + \theta .H_2O$
- (iv).  $\theta .CO_2 \rightleftharpoons CO_2 + \theta$
- (v).  $\theta .H_2O \rightleftharpoons H_2O + \theta$



dimana :

- $\theta$  = fraksi kosong katalis
- $\theta .O_2$  = fraksi pusat aktif yang ditempati oksigen
- $\theta .CH_3CHO$  = fraksi pusat aktif yang ditempati asetaldehida
- $\theta .H_2O$  = fraksi pusat aktif yang ditempati air
- $\theta .CO_2$  = fraksi pusat aktif yang ditempati karbon dioksida
- $\theta .H_2$  = fraksi pusat aktif yang ditempati hidrogen

## USULAN MODEL KINETIKA

Persamaan kinetika dari rangkaian mekanisme reaksi diatas diturunkan berdasarkan pendekatan reaksi tidak balik (irreversibel) dan pendekatan laju reaksi pengendali. Sesuai informasi berbagai literatur reaksi r2 dan r3 diasumsikan berlangsung serta-merta (sangat cepat) dan tidak memberikan pengaruh besar terhadap laju reaksi keseluruhan.

Sehingga laju konversi etanol, akumulasi asetaldehida atau pembentukan CO<sub>2</sub> dan pembentukan dietil eter akan diintegrasikan dengan metode Runge-Kutta orde 4 dalam bentuk persamaan berikut :

$$r_1 = \frac{dX_{EtOH}}{d[W/F_{EtOH} \cdot \theta]}$$

$$r_4 = \frac{dX_{CH_3CHO}}{d[W/F_{EtOH}]}$$

$$r_5 = k_{dec} \cdot [C_2H_5OH]^n$$

$$(W/F)_{EtOH, O} = f(X, k_{sr1}, k_{sr4}, k_{dec}, K_O, \dots)$$

dimana,  $k_{dec}$  = konstanta laju reaksi pembentukan dietil eter,  $n$  = orde reaksi (r5)

Secara umum usulan persamaan kinetika yang akan diuji kecocokannya dengan data eksperimental dapat ditabulasikan seperti pada Table 4.1.

## MEKANISME REAKSI

Diketahui bahwa kedua jalur reaksi yang berpengaruh besar dalam rangkaian proses yaitu oksidasi dan dehidrogenasi merupakan dua reaksi yang independen (bebas). Twigg (1989) menjelaskan bahwa reaksi dehidrogenasi yang endotermik ditunjang oleh reaksi eksotermik pembentukan molekul air dari hidrogen, seperti juga reaksi oksidasi etanol menjadi asetaldehida dan air.

Perak merupakan satu dari sedikit logam yang menunjukkan perilaku non-disosiatif kemisorpsi molekul oksigen pada permukaan katalis logam. Ikatan molekul-molekul oksigen menunjukkan prekursor terhadap oksigen-oksigen teradsorpsi secara disosiatif untuk memahami interaksi molekul oksigen dengan logam.

Dalam studi ini, asetaldehida terbentuk hanya pada saat oksigen berada pada permukaan katalis perak. Pada tekanan rendah, etanol tidak akan terserap dipermukaan bersih perak tapi hanya pada permukaan perak yang mengandung oksigen yang terserap (Kung and Smith, 1994).

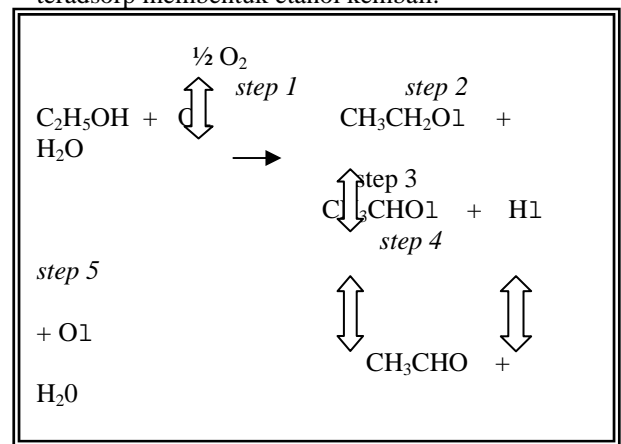
Oksigen teradsorpsi secara atomik atau molekuler pada permukaan perak yang mulus/bersih pada temperatur ruang atau diatasnya, sehingga sticking coefficient (koefisien jumlah tumbukan

dengan permukaan sebelum molekul oksigen teradsorpsi) rendah.

Secara garis besar mekanisme reaksi proses konversi etanol menjadi setaldehida dengan katalis perak ditunjukkan pada Gambar 5 dan 6.

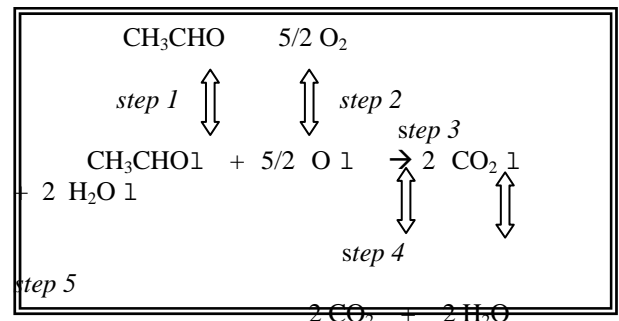
Pada Gambar 5, step 1 menunjukkan pada permukaan perak dengan oksigen yang teradsorpsi, etanol teradsorpsi (step 2) membentuk air dan etoksi teradsorpsi (C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>Oad). Komponen etoksi ini langsung terdekomposisi akibat pemanasan membentuk molekul asetaldehida dan hidrogen teradsorpsi.

Jika oksigen teradsorpsi habis, maka hidrogen teradsorpsi akan bereaksi dengan etoksi teradsorpsi membentuk etanol kembali.



Gambar 5. Mekanisme Umum Reaksi Oksidasi Etanol

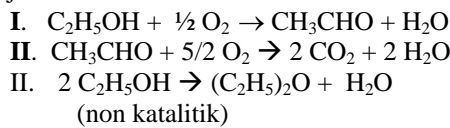
Oksidasi asetaldehida lanjutan (reaksi samping) atau pembentukan CO<sub>2</sub> seperti pada Gambar 4.2, menunjukkan bahwa pada step 1 dan 2 merupakan peristiwa adsorpsi asetaldehida pada permukaan katalis perak, sementara step 3 peristiwa reaksi permukaan, dan step 4 dan 5 masing-masing menunjukkan peristiwa desorpsi molekul-molekul CO<sub>2</sub> dan H<sub>2</sub>O.



Gambar 6. Mekanisme Umum Reaksi Pembentukan CO<sub>2</sub>

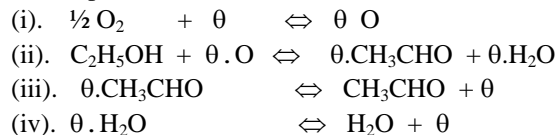
Sehingga secara umum reaksi kompleks proses konversi etanol menjadi

asetaldehida dengan katalis perak dapat ditulis ulang menjadi :

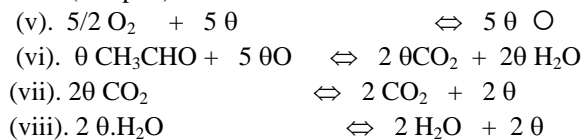


Untuk menginterpretasikan postulasi mekanisme dalam model kinetika, mekanisme final dirumuskan sebagai berikut :

• **Reaksi #I**, tahap pengendali reaksi merupakan (tahap ii)



❖ **Reaksi #II**, tahap pengendali reaksi merupakan (tahap vi)



Karena kedua tahap pengendali reaksi pada kedua reaksi utama diatas adalah reaksi permukaan maka model kinetika yang mewakili proses ini adalah :

$$r_I = \frac{k_{srI} K_O P_O P_E P_O^{1/2}}{(1 + K_O P_O^{1/2} + K_A P_A + K_W P_W + K_C P_C^2)}$$

$$r_{II} = \frac{k_{srII} K_A P_A K_O P_O^{5/2}}{(1 + K_A P_A + K_O P_O^{5/2} + K_C P_C^2 + K_W P_W^2)^2}$$

dimana :

- 1 fraksi kosong katalis
- X1 fraksi pusat aktif katalis yang ditempati X
- $k_{srI}$  konstanta laju reaksi permukaan i
- $K_i$  koefisien adsorpsi kesetimbangan komponen i
- $p_i$  tekanan parsial i

Sementara untuk reaksi non katalitik, persamaan empirik yang mewakilinya adalah

$$r_{III} = \frac{\partial[(C_2H_5)_2O]}{\partial t} = k_{dee} [C_2H_5OH]^n$$

### ESTIMASI PARAMETER KINETIKA

Perkiraan harga-harga parameter kinetika didasarkan pada minimasi fungsi obyektif dari penjumlahan selisih antara data-data perhitungan berdasarkan model kinetika seperti ditabulasikan pada Table 4.2. Prosedur perkiraan parameter ini ditampilkan dalam program komputasi menggunakan perangkat lunak (software) Matlab®.

#### Konstanta Laju Kinetika :

$$k_{srI} = 1.914 \times 10^4 \exp(-11447.66/RT)$$

$$k_{srII} = 1.918 \times 10^4 \exp(-12374.49/RT)$$

$$k_{III} = 3.830 \times 10^3 \exp(-2818.64/RT)$$

#### Koefisien Adsorpsi Kesetimbangan :

$$\ln K_{O_2} = \frac{14472.78}{RT} - \frac{12.608}{R}$$

$$\ln K_A = \frac{15630.72}{RT} - \frac{15.861}{R}$$

$$\ln K_{CO_2} = \frac{16117.98}{RT} - \frac{20.818}{R}$$

$$\ln K_W = \frac{16823.44}{RT} - \frac{23.336}{R}$$

### 6. KESIMPULAN

Pendekatan teoritis terhadap mekanisme reaksi berdasarkan teori isotherm Langmuir – Hinshelwood yang dikonfrontir langsung dengan analisis percobaan memberikan potensi pengujian postulasi mekanisme yang lebih terarah dan mereduksi jumlah proses pengujian dalam algoritma studi kinetika reaksi, dalam hal ini pada konversi etanol menjadi asetaldehida menggunakan katalis perak.

### DAFTAR PUSTAKA

- [1] Box, George E.P., Hunter, William g., Hunter, J.Stuart., "Statistics For Experimenters", John Wiley & Sons, 1978
- [2] Choudhori, A K., Gupta, P S., dan Roy, N C., "Vapour Phase Oxidation of Ethanol to Acetaldehyde over Silver Catalyst : A Rate Study", Indian Journal of technology, Vol 11, hal 342-346, 1973.
- [3] Day, Allan R, " Catalytic Oxidation of Ethyl Alcohol", Journal of Physical Chemistry, vol 35, hal 3272, 1931
- [4] Filho, R., Maciel dan Domingues, " Multitubular Reactor for Obtention of Acetaldehyde by Oxidation of Ethyl Alcohol", Chemical Engineering Science, vol 47, no 9-11, hal 2571, Pergamon Press, 1992.
- [5] Froment, G.F., Bischoff, K.B., "Chemical reactor Analysis & Design", 2nd edition, John Wiley & Sons, New York, 1991
- [6] Hill, Charles G., " An Introduction To Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design", John Wiley & Sons, new York 1991
- [7] Marinov, Nick M., " A Detailed Chemical Kinetics Model for High Temperature Ethanol Oxidation", Chemical Kinetics, John Wiley & Sons, vol 31, 1999
- [8] Satterfield, Charles N., " Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice", Mc Graw Hill, 1991

- [9] Yang, K.H., O.A. Hougen., "Determination of Mechanism of Catalized Gaseous reactions", Chemical Engineering Progress, vol 46, No. 3, 1950