



DIKTISAINTEK
BERDAMPAK

MATERI PERTEMUAN 9-10

MATA KULIAH: TEKNIK REAKSI KIMIA II

Prof. Ir. HERLIATI, M.T., Ph.D

Apa yang akan dipelajari hari ini?

- ❖ PFR
- ❖ RATB
- ❖ LATIHAN SOAL

Karakteristik Reaktor Alir Pipa / Plug Flow Reactor (PFR)

Keunggulan

- Konversi tinggi per unit volume.
- Cocok untuk produksi kontinu.
- Desain sederhana dan biaya operasi rendah.

Kekurangan

- Kontrol suhu sulit, terutama reaksi eksoterm.
- Rentan terhadap fouling, menyebabkan perubahan profil aliran.
- Tidak cocok jika diperlukan pencampuran sempurna.

Untuk PFR/RAP berlaku formula

Laju reaksi r_A bergantung pada orde reaksi, sehingga bentuk integrasinya juga berubah.

$$V = \int_{CA_0}^{CA} \frac{dC_A}{-r_A}$$

Orde nol $-r_A = k$

$$V = \frac{CA_0 - CA}{k} FA_0$$

Orde dua $-r_A = kCA^2$

$$V = FA_0 \int_{X=0}^X \frac{dX}{kCA_0(1-X)^2}$$

$$V = \frac{FA_0}{kCA_0} \left[\frac{X}{1-X} \right]$$

Orde satu $-r_A = kCA$

$$V = FA_0 \int_{X=0}^X \frac{dX}{k(1-X)}$$

$$V = \frac{FA_0}{k} \ln\left(\frac{1}{1-X}\right)$$

Keterangan:

V = volume liquid (m^3)

v_o = laju volumetric (m^3 /menit)

FA_0 = laju mol mula-mula (mol/menit)

CA_0 = Konsentrasi mula-mula (mol/liter)

X = konversi reaksi

Contoh

Reaksi fase gas antara methane (A) dan sulfur (B) berlangsung pada 600°C dan 101 kPa dalam sebuah PFR, reaksi menghasilkan Karbondisulfida dan Hidrogen sulfida. Reaksi orde dua dengan $k_B = 12 \text{ m}^3/\text{mol}/\text{jam}$. Laju mol metana dan sulfur 23,8 dan 47,6 mol/jam, berturut-turut. Tentukan:

1. Volume (V) yang diperlukan untuk mencapai konversi 18% terhadap metana
2. Residence time (s).
3. Tentukan apakah reaksi eksotermis atau endotermis
4. Tentukan kebutuhan pemanas atau pendingin yang diperlukan

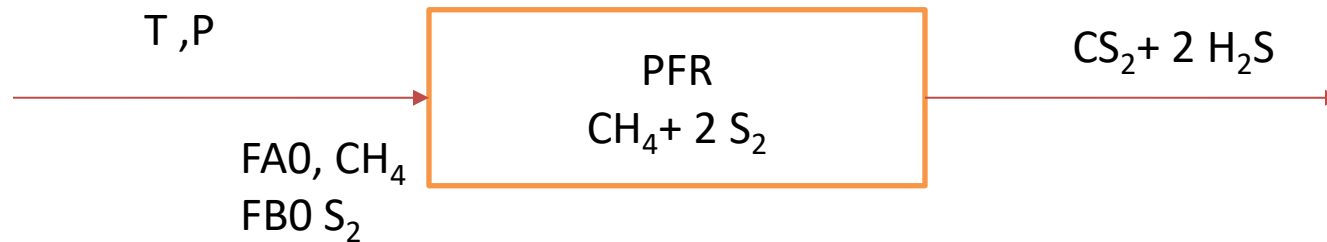
Penyelesaian

Reaksi:



Meskipun reaksi fase gas, karena T, P tetap maka total molar flow rate dan density diasumsi konstan. Selain itu, karena reaktan diumpankan dengan rasio stoichiometric, perhitungan akan merujuk ke B (Sulfur) dengan nilai k_B , yang diberikan, konversi terhadap metana ($= X_A$) = 0.18. dari reaksi dapat dilihat bahwa $C_A = C_B / 2$. Persamaan laju reaksi ditulis sbb:

Skema reactor PFR



Keterangan:

1. Umpan masuk dengan laju mol F_{AO} dan F_{BO}
2. Di dalam pipa terjadi reaksi kontinu dimana Konsentrasi & suhu berubah sepanjang pipa
3. Produk keluar dengan konversi yang diinginkan yaitu 18 %

Penyelesaian

Data Soal:

Reaksi antara gas Metana dan Sulfur menghasilkan karbon disulfida dan H₂S

$$k = 12 \text{ m}^3/\text{mol}/\text{jam}$$

$$FA_o = 23.8 \text{ mol}/\text{jam} ; FB_o = 47.6 \text{ mol}/\text{jam}$$

$$X = 0,18$$

$$(-r_B) = k_B C_A C_B$$

1. Perhitungan konsentrasi awal komponen dalam PFR

$$FT_o = FA_o + FB_o = 23,8 + 47,6 = 71,4 \text{ mol}/\text{jam}$$

Gunakan persamaan gas ideal untuk mencari volumetric flow, v_o :

$$v_o = \frac{FT_o RT}{P}$$

Gunakan:

$$R = 8,314 \text{ kPa}/\text{m}^3/\text{kmol}/\text{K}$$

$$71,4 \text{ mol}/\text{jam} = 0,0714 \text{ kmol}/\text{jam}$$

$$v_0 = \frac{(F_{A0} + F_{B0}) RT}{P} = \frac{0,0714(8,314)(873)}{101} = 5,12 m^3 / jam$$

Menghitung Konsentrasi mula-mula

$$CA_0 = \frac{23,8}{5,12} = 4,65 \text{ mol}/m^3$$

$$CB_0 = \frac{47,6}{5,12} = 9,3 \text{ mol}/m^3$$

Reaksi: $A + 2B \rightarrow \text{Produk}$

Untuk konversi X:

$$CA = CA_0(1 - X)$$

$$CB = CB_0 - 2CA_0X \quad \text{Karena } CB_0 = 2CA_0$$

Maka:

$$CB = 2CA_0 - 2CA_0X$$

$$CB = 2CA_0(1 - X)$$

Sehingga:

$$CA = CA_0(1 - X)$$

$$CB = 2CA_0(1 - X)$$

Desain PFR

Orde dua $-r_A = k_b 2CA^2$

$$V = FA_o \int_{X=0}^X \frac{dX}{2k_B CA_0^2 (1-X)^2}$$

$$V = \frac{FA_o}{2k_B CA_0^2} \left[\frac{1}{1-X} - 1 \right]$$

$$V = \frac{23,8}{(2)(12)(21,53)} \left(\frac{1}{0,82} - 1 \right) = 0,01 \text{ m}^3$$

Menghitung resident time sbb:

$$\tau = \frac{V}{v_0} = \frac{0,01}{5,12} = 0,00197 \text{ jam} = 7 \text{ detik}$$

Menentukan apakah reaksi eksotermis atau endotermis

Untuk reaksi:



kita bisa tentukan apakah eksotermis atau endotermis dengan menghitung ΔH_{reaksi}^0 298 dari data entalpi pembentukan standar.

Data entalpi pembentukan standar:

$$\Delta H_f^\circ(\text{CH}_4(g)) = -74,8 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{H}_2\text{S}(g)) \approx -20,6 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{CS}_2(l)) \approx +89,4 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_f^\circ(\text{S}(s, \text{rhombic})) = 0 \text{ kJ/mol (unsur pada keadaan standar)}$$

Hitung ΔH_{reaksi}^0

Rumus umum:
$$\Delta H_{reaksi}^0 = \sum v_p \Delta H_f^0(\text{produk}) - \sum v_r \Delta H_f^0(\text{reaktan})$$

Produk:
$$\begin{aligned} \sum v_p \Delta H_f^0(\text{produk}) &= \Delta H_f^0(\text{CS}_2) + 2\Delta H_f^0(\text{H}_2\text{S}) \\ &= 89,4 + 2(-20,6) = 88,2 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Reaktan:
$$\begin{aligned} \sum v_r \Delta H_f^0(\text{reaktan}) &= \Delta H_f^0(\text{CH}_4) + 2\Delta H_f^0(\text{S}) \\ &= -74,8 + 0 = -74,8 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

$$\Delta H_{reaksi}^0 = 88,2 - (-74,8) \approx 123 \text{ kJ/mol}$$

Limiting reaktan yang bereaksi = 4,284 mol jam

Maka:
$$\Delta H_{reaksi}^0 = (4,284) \frac{\text{mol}}{\text{Jam}} (123) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = 526,93 \text{ kJ/Jam}$$

Kesimpulan: Tanda positif berarti reaksi menyerap panas dari lingkungan. Artinya reaksi endotermis.

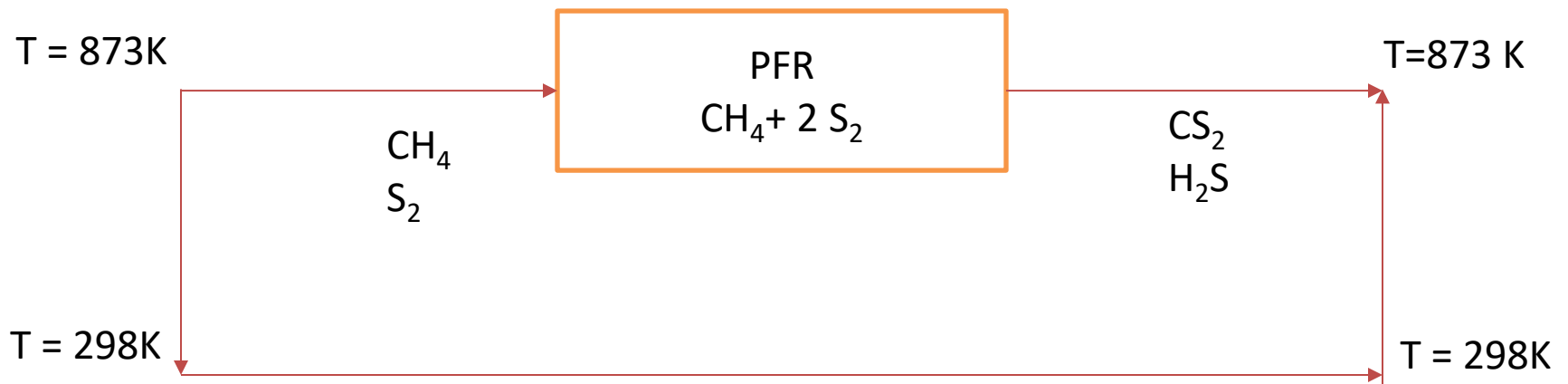
Menghitung suplay panas yang diperlukan

Sediakan data cp untuk masing-masing senyawa

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Senyawa	a	b	c	d x 10 ¹²	Satuan cp
CH ₄ (g)	1.99E-02	5.02E-05	1.27E-08	-1.10E-11	kJ/mol/K
S(s)	1.52E-02	2.68E-05	0.00E+00	0.00E+00	kJ/mol/K
CS ₂ (g)	4.15E-02	2.33E-05	1.08E-08	-4.50E-12	kJ/mol/K
H ₂ S (g)	3.35E-02	1.55E-05	3.01E-09	-3.53E-12	kJ/mol/K

Menghitung $\Delta H(600^\circ\text{C} = 873 \text{ K})$ dengan hukum hess



Persamaan integrasi Cp Reaktan

Untuk:

$$C_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Integrasinya:

$$\int C_p(T)dT = aT + \frac{b}{2}T^2 + \frac{c}{3}T^3 + \frac{d}{4}T^4 + C$$

Untuk perbedaan entalpi 298 → 873 K:

$$\Delta H = a(T_2 - T_1) + \frac{b}{2}(T_2^2 - T_1^2) + \frac{c}{3}(T_2^3 - T_1^3) + \frac{d}{4}(T_2^4 - T_1^4)$$

Dengan:

$$T_1 = 873 \text{ K}$$

$$T_2 = 298 \text{ K}$$

Persamaan integrasi Cp Produk

Untuk:

$$C_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Integrasinya:

$$\int C_p(T) dT = aT + \frac{b}{2}T^2 + \frac{c}{3}T^3 + \frac{d}{4}T^4 + C$$

Untuk perbedaan entalpi 298 → 873 K:

$$\Delta H = a(T_2 - T_1) + \frac{b}{2}(T_2^2 - T_1^2) + \frac{c}{3}(T_2^3 - T_1^3) + \frac{d}{4}(T_2^4 - T_1^4)$$

Dengan:

- $T_1 = 298$
- $T_2 = 873$



Data Cp (T) masing-masing senyawa

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Senyawa	a	b	c	d x 10 ¹²	Satuan cp
CH4 (g)	1.99E-02	5.02E-05	1.27E-08	-1.10E-11	kJ/mol/K
S(s)	1.52E-02	2.68E-05	0.00E+00	0.00E+00	kJ/mol/K
CS2 (g)	4.15E-02	2.33E-05	1.08E-08	-4.50E-12	kJ/mol/K
H2S (g)	3.35E-02	1.55E-05	3.01E-09	-3.53E-12	kJ/mol/K

Menghitung ΔH Reaktan dari 873 K $\rightarrow$ 298 K

$$\Delta H_{reaktan} = \sum v_R \int_{873}^{298} C_{p_R}(T) dT$$

Menghitung ΔH Reaktan dari 873 K $\rightarrow$ 298 K

$$\Delta H_{CH_4} = a (T_2 - T_1) + \frac{b}{2} (T_2^2 - T_1^2) + \frac{c}{3} (T_2^3 - T_1^3) + \frac{d}{4} (T_2^4 - T_1^4)$$

$$\Delta H_{CH_4}$$

$$\begin{aligned} &= 1,99 \times 10^{-2} (298 - 873) + \frac{5,02 \times 10^{-5}}{2} (298^2 - 873^2) \\ &+ \frac{1,27 \times 10^{-8}}{3} (298^3 - 873^3) + \frac{-1,1 \times 10^{-12}}{4} (298^4 - 873^4) \\ &= -11,43 - 16,9 - 2,7 + 1,58 = -29,45 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Lakukan perhitungan yang sama untuk ΔH_S ,

Diperoleh: $\Delta H_S = 17,76 \text{ kJ/mol}$

Limiting reaktan yang bereaksi CH_4 sebesar 4,284 dan S bereaksi $2 \times 4,284$; maka:

$$\Delta H_R = (4,284) \frac{\text{mol}}{\text{jam}} (-29,45) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} + 2(4,284) \frac{\text{mol}}{\text{jam}} (-17,830) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\Delta H_R = -126,18 + (-152,19) = -278,369 \text{ kJ/Jam}$$

Menghitung ΔH Produk dari 298 K $\rightarrow$ 873 K

$$\Delta H_{CS_2} = a (T_2 - T_1) + \frac{b}{2} (T_2^2 - T_1^2) + \frac{c}{3} (T_2^3 - T_1^3) + \frac{d}{4} (T_2^4 - T_1^4)$$

$$\Delta H_{CS_2}$$

$$\begin{aligned} &= 4,15 \times 10^{-2} (873 - 298) + \frac{2,33 \times 10^{-5}}{2} (873^2 - 298^2) \\ &+ \frac{1,08 \times 10^{-8}}{3} (873^3 - 298^3) + \frac{-4,5 \times 10^{-12}}{4} (873^4 - 298^4) \\ &= 23,87 + 7,84 + 2,3 - 0,64 = 33,37 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Lakukan perhitungan yang sama untuk ΔH_{H_2S} ,

Diperoleh: $\Delta H_{H_2S} = 24,61 \text{ kJ/mol}$

$$\Delta H_P = (4,284) \frac{\text{mol}}{\text{Jam}} (33,37) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} + 2(4,284) \frac{\text{mol}}{\text{Jam}} (24,61)$$

$$\Delta H_P = 142,9726 + 210,8785 = 353,8511 \frac{\text{kJ}}{\text{Jam}}$$

Gunakan hukum Hess untuk menghitung $\Delta H_{873\text{ K}}$

$$\Delta H_{873} = \Delta H_R + \Delta H_{298}^0 + \Delta H_P$$

Inputkan hasil perhitungan sebelumnya, maka:

$$\Delta H_{873} = (-278,369) + 526,93 + 353,851 = 602,414 \frac{\text{kJ}}{\text{Jam}}$$

Azas Black mengatakan panas yang diperlukan system = panas yang disuplay oleh pemanas.

$$Q = \Delta H = 602,414 \text{ kJ/jam}$$

Catatan:

Steam TIDAK bisa digunakan sebagai media pemanas pada 873 K (600°C). Hal ini karena Pada 600°C, steam akan mengalami degradasi material, kehilangan densitas, dan sangat tidak efisien sebagai media pemanas.

Solusinya akan digunakan hot fuel/furnace
Dengan gas alam sebagai burner

Menghitung kebutuhan Natural Gas

Asumsi efisiensi pembakaran 75%

$$Q_{Fuel} = \frac{Q_{Reaksi}}{\eta}$$

$$Q_{Fuel} = \frac{602,414}{0,75} = 803,218 \frac{kJ}{Jam}$$

Ini adalah energi yang harus disediakan oleh natural gas.

Menghitung kebutuhan Natural Gas

Menghitung kebutuhan Natural Gas

$$\text{Heating value (LHV)} = 38 \text{ MJ/m}^3 = 38,000 \text{ kJ/m}^3$$

Atau

$$\text{LHV} = 50 \text{ MJ/kg} = 50,000 \text{ kJ/kg}$$

Kebutuhan NG basis volumetrik (m^3/jam)

$$V_{NG} = \frac{Q_{Fuel}}{HV} = \frac{803,218 \text{ kJ/Jam}}{38000 \text{ kJ/m}^3}$$

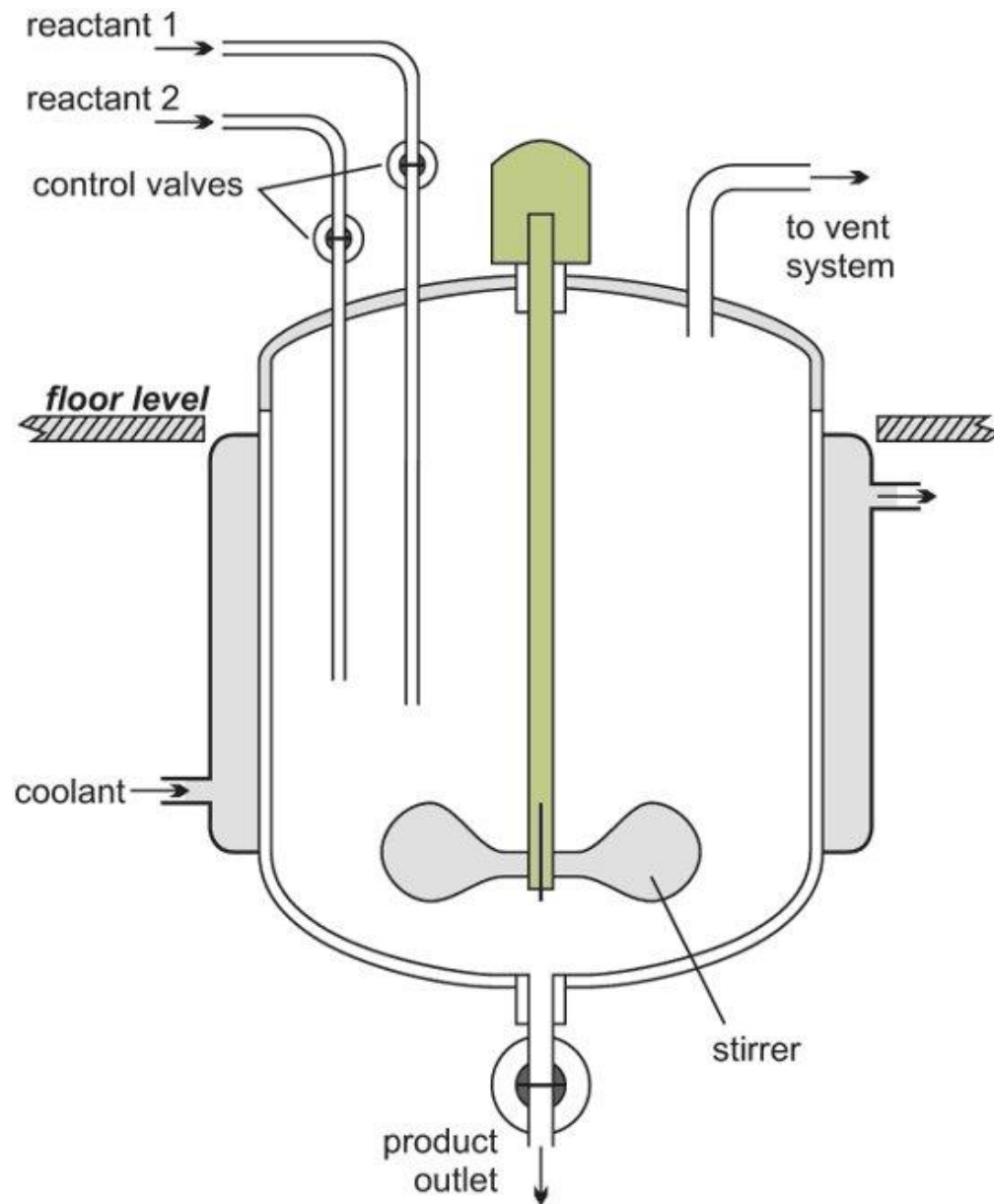
$$V_{NG} = 0,0211 \text{ m}^3/\text{Jam}$$

Kebutuhan NG basis massa (kg/jam)

$$m_{NG} = \frac{Q_{Fuel}}{HV} = \frac{803,218 \text{ kJ/Jam}}{50000 \text{ kJ/kg}}$$

$$V_{NG} = 0,016 \text{ kg/Jam}$$

KONFIGURASI REAKTOR ALIR TANGKI BERPENGADUK



Untuk RATB berlaku formula

$$V = \frac{F_{A0} X_A}{-r_A}$$

Space time atau resident time (τ) dan space velocity (s)

$$\tau = \frac{V}{v_0}; \quad \text{dimana } v_0 = \frac{F_{A0}}{C_{A0}}$$

$$\text{Maka: } \tau = \frac{C_{A0} \cdot V}{F_{A0}}$$

$$s = \frac{1}{\tau}$$

Keterangan:

V = volume liquid (m^3)

v_0 = laju volumetric (m^3/menit)

F_{A0} = laju mol mula-mula (mol/menit)

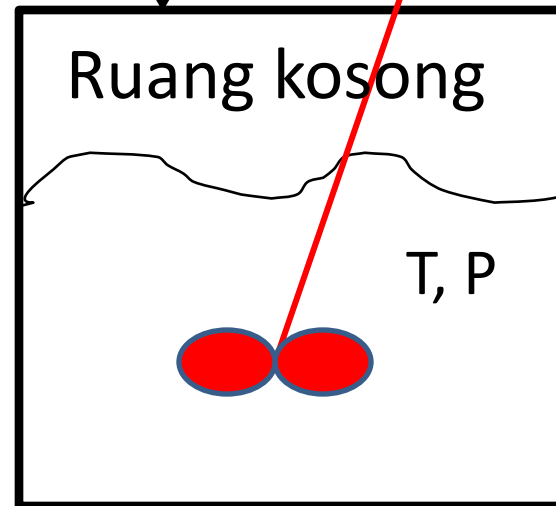
C_{A0} = Konsentrasi mula-mula (mol/liter)

X_A = Konversi terhadap A

UMPAN/INPUT

ILUSTRASI

$$\begin{aligned} C_{A0} \\ X_{A0} = 0 \\ F_{A0} \end{aligned}$$



PRODUK/OUTPUT

$$\begin{aligned} C_A \\ X_A \\ F_A \\ (-r_A) \end{aligned}$$

Untuk reaksi fase cair (ρ konstan), $\varepsilon_A = 0$

$$V = F_{A0} \frac{X_A}{-r_A} = F_{A0} \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}(-r_A)} \text{ atau}$$

$$\frac{C_{A0}V}{F_{A0}} = \frac{C_{A0}X_A}{-r_A} \text{ atau}$$

$$\tau = \frac{C_{A0}X_A}{-r_A} = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A}$$

Persamaan performance reaktor

Untuk orde 1 dimana ρ konstan dan $\varepsilon_A = 0$

Persamaan laju reaksi orde 1 $-r_A = kC_A$

$$\tau = \frac{C_{A0}X_A}{kC_A} \text{ atau } \tau = \frac{C_{A0} - C_A}{kC_A}$$

Maka:

$$k\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{C_A} \text{ atau: } \tau = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A}$$

Persamaan performance reaktor

Untuk orde 1 dimana ρ berubah $\rightarrow \varepsilon_A = \text{sesuatu}$

Persamaan laju reaksi orde 1 $-r_A = kC_A = k.CAo(1-X)$

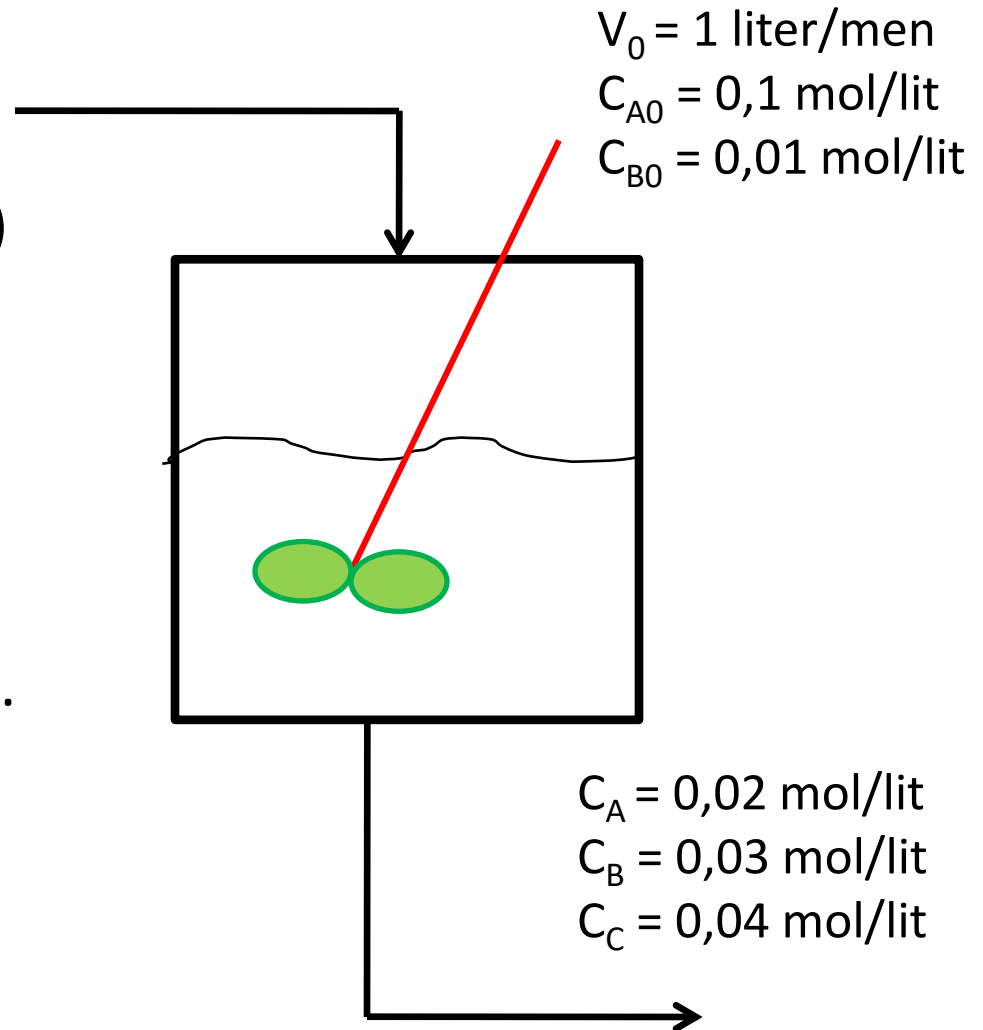
Maka:

$$\tau = \frac{X_A(1 + \varepsilon_A \cdot X_A)}{k(1 - X_A)}$$

$$k\tau = \frac{X_A(1 + \varepsilon_A \cdot X_A)}{(1 - X_A)}$$

Contoh: Laju reaksi pada RATB Fase Cair

1 liter per menit liquid yang terdiri dari A dan B ($C_{A0} = 0,1$ mol/liter; $C_{B0} = 0,01$ mol/liter) diumpankan ke reaktor yang mempunyai volume ($V = 1$ liter). Output reaktor mengandung A, B, C dimana ($C_A = 0,02$ mol/liter; $C_B = 0,03$ mol/liter ; $C_C = 0,04$ mol/liter). Tentukan laju reaksi untuk A, B, dan C



Untuk fase liquid dimana $\varepsilon_A = 0$

Persamaan yang digunakan adalah

$$\begin{aligned} -r_A &= \frac{C_{A0} - C_A}{\tau} = \frac{C_{A0} - C_A}{V/v_0} = \frac{0,1 - 0,02}{1/1} \\ &= 0,08 \text{ mol/liter.menit} \end{aligned}$$

$$-r_B = \frac{C_{B0} - C_B}{\tau} = \frac{0,01 - 0,03}{1} = -0,02 \text{ mol/liter.men}$$

$$-r_C = \frac{C_{C0} - C_C}{\tau} = \frac{0 - 0,04}{1} = -0,04 \text{ mol/liter.men}$$

Kesimpulan: A adalah reaktan; B dan C adalah produk

Contoh

Reaksi fase cair antara bromine cyanide (A) dan methylamine berlangsung dalam sebuah RATB dengan kondisi 10°C dan 101 kPa . Reaksi orde dua di mana $k_A = 2.22 \times 10^{-3}\text{ L/mol/detik}$. Jika residence time adalah 1407 detik , dan konsentrasi reaktan umpan masing-masing 0.10 mol /L , tentukan:

1. Konsentrasi bromine cyanide keluar reactor
2. laju reaksi
3. Volume reactor untuk menghasilkan 126 g/detik produk sianamida jika diasumsikan terdapat 20% ruang kosong dalam reactor
4. Apakah reaksi eksoterm atau endoterm?

Penyelesaian

Reaksi yang terjadi adalah:



Karena reaksi pada fase liquid, diasumsikan densitas konstan. Selain itu, konsentrasi A dan B diasumsikan sama. Maka, persamaan laju reaksi dapat ditulis sbb:

Kata kunci: RATB = CSTR, fase cair, reaksi orde dua:



$$-r_A = k_A C_A C_B \quad k_A = (2,22) \frac{L}{\text{mol} \cdot \text{detik}}$$

Data:

$$k_A = 2,22 \times 10^{-3} \text{ L/mol/s ;}$$

$$C_{A0} = C_{B0} = 0,1 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\tau = 1407 \text{ detik;}$$

T 10 °C, tekanan 101 kPa (tidak berpengaruh ke hitungan kinetika fase cair di sini).

Karena umpan equimolar A dan B dengan stoikiometri 1:1, maka di reaktor: $C_A = C_B$

1. Menentukan konsentrasi BrCN keluar reaktor:

Untuk CSTR:
$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{-r_A}$$

Laju Reaksi:
$$-r_A = k_A C_A C_B = k C_A^2$$

Definisi konversi:
$$X = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}} \Rightarrow C_A = C_{A0}(1 - X)$$

Maka:
$$\tau = \frac{C_{A0}X}{k C_A^2} = \frac{0,1X}{k \cdot C_{A0}^2 (1 - X)^2} = \frac{10X}{k(1 - X)^2}$$

Masukkan $\tau = 1407\text{s}$, $k = 2,22 \times 10^{-3}$:

$$1407 = \frac{10X}{2,22 \times 10^{-3}(1 - X)^2}$$

selesaikan dengan goal seek
 $X \approx 0,2$

1. Menentukan konsentrasi BrCN keluar reaktor:

$$\begin{aligned}C_A &= C_{A0}(1 - X) = 0,1(1 - 0,2) \\&= 0,08 \frac{\text{mol}}{\text{L}} = 8 \times 10^{-2} \frac{\text{mol}}{\text{L}}\end{aligned}$$

2. Menentukan laju reaksi di dalam reaktor:

Karena $C_A = C_B \approx 0,08 \text{ mol/L}$:

$$\begin{aligned}-r_A &= kC_AC_B = kC_A^2 = (2,22 \times 10^{-3})(8 \times 10^{-2})^2 \\&= 1,42 \times 10^{-5} \frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{detik}}\end{aligned}$$

3. Menentukan Volume reaktor untuk menghasilkan 126 g/s sianamida:

Asumsi kondisi tunak:

$$V = \frac{F_{A0} X_A}{-r_A}$$

Inputkan nilai:

$$X_A = 0,2; -r_A = 1,42 \times 10^{-5} \left(\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{detik}} \right)$$

$$\text{Produk} = \frac{(126) \frac{\text{g}}{\text{detik}}}{(42) \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 3 \frac{\text{mol}}{\text{detik}} \quad FA_0 = \frac{(3) \text{mol/detik}}{0,2} \approx 15$$

Maka volume liquid:

$$V_L = \frac{(15)(0,2)}{1,42 \times 10^{-5}} \approx 135 \text{ m}^3$$

Terdapat ruang kosong 20%, maka Volume reaktor:

$$V_R = \frac{150}{0,8} \approx 187,5 \text{ m}^3$$

4 Menentukan apakah reaksi eksotermis atau endotermis

Untuk reaksi:



kita bisa tentukan apakah eksotermis atau endotermis dengan menghitung ΔH_{reaksi}^0 298 dari data entalpi pembentukan standar.

Data entalpi pembentukan standar:

Senyawa	Fase (25 °C)	$\Delta H_f^0, 298$ (kJ/mol)
BrCN	s	+140.4 ± 4.3
CH ₃ NH ₂	l	-44.83 ± 0.52
H ₂ NCN (cyanamide)	cr	+58.91 ± 0.54
HBr	aq	-121.6

Hitung ΔH_{reaksi}^0

Rumus umum:
$$\Delta H_{reaksi}^0 = \sum v_p \Delta H_f^0(\text{produk}) - \sum v_r \Delta H_f^0(\text{reaktan})$$

Produk:
$$\begin{aligned} \sum v_p \Delta H_f^0(\text{produk}) &= \Delta H_f^0(\text{NH}_2\text{CN}) + \Delta H_f^0(\text{CH}_3\text{Br}) \\ &= 58,9 + (-121,6) = -62,7 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Reaktan:
$$\begin{aligned} \sum v_r \Delta H_f^0(\text{reaktan}) &= \Delta H_f^0(\text{BrCN}) + \Delta H_f^0(\text{CH}_3\text{NH}_2) \\ &= 140,4 + (-44,8) = 95,6 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

$$\Delta H_{reaksi}^0 = -62,7 - (95,6) \approx -158,3 \text{ kJ/mol}$$

Limiting reaktan yang bereaksi = (15) mol/detik x Konversi
$$= 15 \times 0,2 = 3 \text{ mol/detik}$$

Maka:
$$\Delta H_{reaksi}^0 = (3) \frac{\text{mol}}{\text{detik}} (-158,3) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = -474,9 \text{ kJ/detik}$$

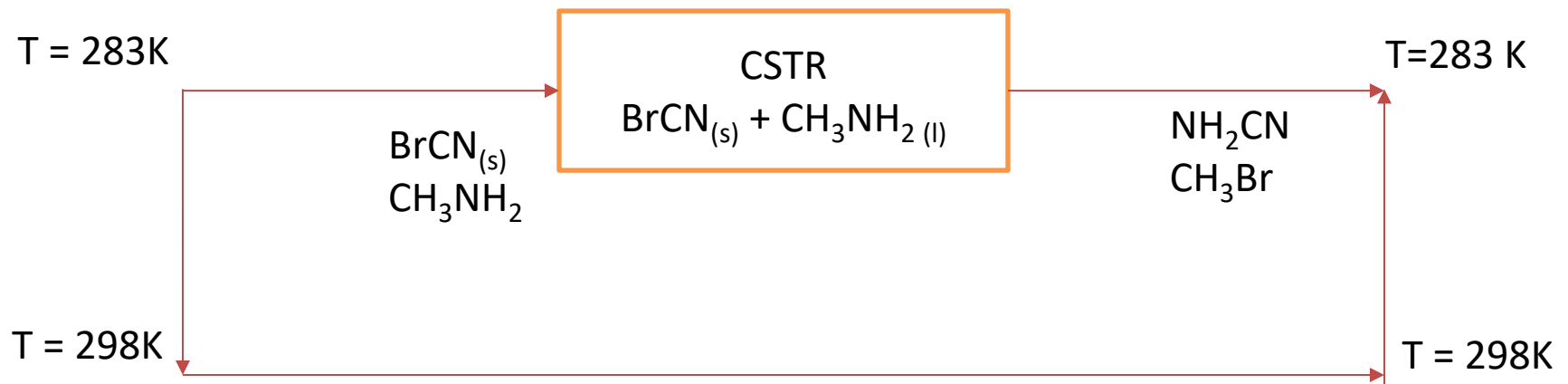
Kesimpulan: Tanda negatif berarti reaksi melepaskan panas ke lingkungan. Artinya reaksi eksotermis.

Menghitung $\Delta H(10^\circ\text{C} = 283 \text{ K})$ dengan hukum hess

Catatan penting: data $C_p(T)$ spesifik dalam bentuk $a + bT + cT^2 + dT^3$ untuk senyawa organik ini jarang tersedia.

Karena rentang temperatur yang kita pakai **sangat sempit** ($298 \rightarrow 283 \text{ K}$, hanya 15 K), secara teknik lazim **Cp dianggap konstan** pada nilai di sekitar 298 K .

Itu identik dengan polinomial $C_p(T) = a$)dimana $b=c=d=0$),



Persamaan integrasi Cp Reaktan

Untuk persamaan polinomial

$$C_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Dimana $b=c=d=0$; maka integrasinya

$$\int C_p(T) = aT$$

$$\Delta H = a(T_2 - T_1)$$

Dengan

$$T_1 = 283 \text{ K}$$

$$T_2 = 298 \text{ K}$$

Persamaan integrasi Cp Produk

$$C_p(T) = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Dimana $b=c=d=0$; maka integrasinya

$$\int C_p(T) = aT$$

$$\Delta H = a(T_2 - T_1)$$

Dengan

$$T_1 = 298 \text{ K}$$

$$T_2 = 283 \text{ K}$$

Data C_p (T) masing-masing senyawa (kJ/mol)

- BrCN: $C_{p,R1} \approx 0,0471$
- CH₃NH₂: $C_{p,R2} \approx 0,102$
- H₂NCN: $C_{p,P1} \approx 0,0782$
- HBr: $C_{p,P2} \approx 0,028$

Untuk kisaran 283–298 K, kita tuliskan polinomial paling sederhana:

$$C_p(T) \approx a \quad \Rightarrow \quad a = C_p(298), \quad b = c = d = 0$$

Menghitung ΔH Reaktan dari 283 K $\rightarrow$ 298 K

$$\Delta H_{reaktan} = \sum v_R \int_{283}^{298} C_{p_R}(T) dT$$

Menghitung ΔH Reaktan dari 283 K $\rightarrow$ 298 K

$$\Delta H_{\text{BrCN}} = a (T_2 - T_1)$$

$$\Delta H_{\text{BrCN}} = 0,0471(298 - 283) = 0,7065 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{CH}_3\text{NH}_2} = a (T_2 - T_1)$$

$$\Delta H_{\text{CH}_3\text{NH}_2} = 0,102(298 - 283) = 1,53 \text{ kJ/mol}$$

Limiting reaktan yang bereaksi BrCN sebesar 3 dan CH_3NH_2 bereaksi juga sama 3 mol/detik, maka:

$$\Delta H_R = (3) \frac{\text{mol}}{\text{detik}} (0,7065) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} + (3) \frac{\text{mol}}{\text{detik}} (1,53) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\Delta H_R = 2,1195 + (4,59) = 6,7095 \text{ kJ/detik}$$

Menghitung ΔH Produk dari 298 K $\rightarrow$ 283 K

$$\Delta H_{\text{H}_2\text{NCN}} = a (T_2 - T_1)$$

$$\Delta H_{\text{H}_2\text{NCN}} = 0,0782 (283 - 298) = -1,173 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta H_{\text{HBr}} = a (T_2 - T_1)$$

$$\Delta H_{\text{HBr}} = 0,028 (283 - 298) = -0,42 \text{ kJ/mol}$$

Produk yang dihasilkan H_2NCN dan HBr sebesar 3 mol/detik, maka:

$$\Delta H_P = (3) \frac{\text{mol}}{\text{detik}} (-1,173) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} + (3) \frac{\text{mol}}{\text{detik}} (-0,42)$$

$$\Delta H_P = -3,519 + (-1,26) = -4,779 \frac{\text{kJ}}{\text{detik}}$$

Gunakan hukum Hess untuk menghitung $\Delta H_{873\text{ K}}$

$$\Delta H_{873} = \Delta H_R + \Delta H_{298}^0 + \Delta H_P$$

Inputkan hasil perhitungan sebelumnya, maka:

$$\Delta H_{283} = (6,7095) + (-474,9) + (-4,779) = -472,97 \frac{\text{kJ}}{\text{detik}}$$

Azas Black mengatakan panas yang dilepaskan system =
panas yang diserap oleh pendingin.

$$\begin{aligned} Q &= \Delta H = 472,97 \text{ kJ/detik} \\ &= 472,97 \text{ kW} \end{aligned}$$

Catatan: Tanda aslinya **negatif** (karena eksoterm), tapi untuk kebutuhan desain beban panas, biasanya kita hilangkan tanda negative.

Reaktor harus mampu membuang sekitar 95 kW panas pada 10 °C.

Menentukan media pendingin

Kondisi sistem:

- Reaktor cair, reaksi sangat eksoterm ($\approx 472,97$ kW pada hasil perhitungan).
- Suhu operasi 10°C (283 K), dan ingin dipertahankan konstan (isothermal).
- Skala kapasitas lumayan besar (15 mol/s A, $X = 0,2$).

Apakah cooling water biasa cukup?

Analisis:

Kalau reaktor harus berada di 10°C , maka: Cooling water biasa terlalu hangat $\rightarrow$ bukannya mendinginkan, malah menghangatkan reaktor. Jadi tidak cocok untuk kontrol di 10°C .

Beberapa alternatif media pendingin

1. Chilled water (air dingin) 5–8°C:

- Sirkulasi dari sistem refrigerasi (chiller).
- Cocok dipakai di jacket atau coil.
- Range tipikal: 5–12°C.

2. Brine / larutan glikol (ethylene glycol atau propylene glycol)

- Range umum: –10 sampai +10°C.
- Cocok untuk sistem yang butuh stabilitas di 10°C.

3. Refrigerant langsung (R-134a, R-404a, dll.)

- Biasanya dipakai tidak langsung di jacket reactor.
- Umumnya refrigerant dipakai di chiller, lalu chiller menghasilkan chilled water / brine yang mengalir di jacket reaktor.

Kesimpulan: digunakan media pendingin: chilled water atau brine pada 5–8°C yang disirkulasikan melalui jacket / cooling coil di reaktor.

Menentukan kebutuhan media pendingin (chilled water)

Sesuai dengan azas black $Q_{Pendingin} = \Delta H_{283K} = 472,97 \text{ kJ/detik}$

Kondisi chilled water

$T_{in} = 5K$; $T_{out} = 8K$; $\Delta T \text{ chilled} = 8 - 5 = 3 \text{ K}$

$C_p \text{ air} \approx 4,18 \text{ kJ/kg} \cdot K$

Kebutuhan laju massa chilled water:

$$M_{cw} = \frac{Q}{C_p \Delta T} = \frac{472,97 \text{ kJ/detik}}{(4,18) \text{ kJ/kg} \cdot K (3) K}$$

$$M_{cw} = \frac{472,97 \text{ kJ/detik}}{12,54 \text{ kJ/kg}} = 37,72 \text{ kg/detik}$$

Karena $\rho \text{ air} \approx 1 \text{ kg/L}$

$$V_{cw} = 37,72 \frac{L}{\text{detik}} = 135,792 \frac{m^3}{Jam}$$

Menentukan Desain Jacket pendingin

1. Data Dari perhitungan sebelumnya:

Laju panas yang harus dibuang: $Q = 472,97 \text{ kW} = 472.970 \text{ W}$

Suhu Reaktor $T_R = 10^\circ\text{C}$

Media pendingin chilled water / brine

$$\Delta T_{\text{inlet}} ; \Delta T_1 = T_R - T_{c,\text{in}} = 10 - 5 = 5 \text{ K}$$

$$\Delta T_{\text{outlet}} ; \Delta T_2 = T_R - T_{c,\text{out}} = 10 - 8 = 2 \text{ K}$$

LMTD:

$$\Delta T_{LMTD} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} = \frac{5 - 2}{\ln\left(\frac{5}{2}\right)} = \frac{3}{0,916} = 3,27 \text{ K}$$

2. Asumsi koefisien perpindahan panas menyeluruh (U)

Untuk reaktor berpengaduk dengan jacket berisi air pendingin (chilled water):

Tipikal $U = 300\text{--}600 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$ (tergantung viskositas, baffle, kecepatan alir jacket, dll.)

Untuk desain awal, ambil:

- Jacket luar: $U \approx 400 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$
- Coil internal (kalau pakai coil di dalam): bisa sedikit lebih tinggi, misal $U \approx 600 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$

3. Menghitung luas perpindahan panas A

Persamaan dasar:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{LMTD} \qquad A = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{LMTD}}$$

Opsi 1: Menggunakan Jacket; $U \approx 400 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$

$$A = \frac{171.000 \text{ W}}{(400) \text{ W/m}^2 \cdot \text{K} (3,27) \text{ K}} = 130,6 \text{ m}^2$$

Opsi 1: Menggunakan coil; $U \approx 600 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$

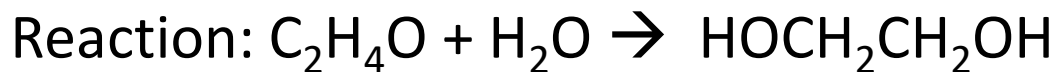
$$A = \frac{472.970 \text{ W}}{(600) \text{ W/m}^2 \cdot \text{K} (3,27) \text{ K}} = 241 \text{ m}^2$$

Catatan: Dalam praktik, nilai ini biasanya dinaikkan sedikit (10–20%) sebagai faktor safety. Disesuaikan lagi dengan U aktual setelah ada data operasi.

SOAL

- Ingin diproduksi 200 juta kg per tahun (1 Tahun 360 hari) etilen glikol. Reaktor beroperasi secara kontinu dan isothermal pada suhu 60°C. Etilen oksida diumpankan ke reactor bersama dengan air dengan perbandingan volume yang sama dimana etilen oksida memiliki konsentrasi 1 kmol/m³. Jika konversi terhadap etilen oksida adalah 80 %. Tentukan: Volume Reaktor yang diperlukan

Diketahui: $k_A = 0.0311$ L/mol/menit (reaksi orde 2)



SOLUTION:

Untuk CSTR digunakan :

$$V = \frac{F_{A0} X_A}{-r_A}$$

Reaction: $C_2H_4O + H_2O \rightarrow HOCH_2CH_2OH$

Menentukan Mol produk :

$m = 200 \times 10^6 \text{ kg/tahun} = 385,802 \text{ kg/menit} = 6,2226 \text{ kmol/menit}$

Dari reaksi: mol C_2H_4O bereaksi = mol produk.

Laju Mol C_2H_4O mula2 = C_2H_4O bereaksi/fraksi konversi
 $= 6,2226 / 0,8 = 7,7782 \text{ kmol/menit} = F_{A0}$

$$V = \frac{F_{A0} X_A}{k C_{A0}^2 (1 - X_A)^2}$$

$$V = \frac{6,2226 \times 0,8}{0,0311 \times 1^2 (1 - 0,8)^2} = 5002,106 \text{ m}^3$$

Problem:

Consider the gas-phase decomposition of ethane (A) to ethylene at 750°C and 101 kPa (assume both constant) in a reactor. If the reaction is second-order with $k_A = 0.534 \text{ L/mol/s}$ and τ is 1 s, Determine the Volume of the reactor to achieve 65 % conversion of ethane with an inlet mol flow rate is 35.5 kmol/jam. For CSTR and PFR

Data :

$T = 750^\circ\text{C}$; $P = 101 \text{ kPa}$ both are constant

$K_A = 0,534 \text{ L/mol/s}$

$X_A = 65\%$

$FA_0 = 35.5 \text{ kmol/jam} \Rightarrow 9.86 \text{ mol/s}$

SOLUTION:

CSTR Design Equation

$$V = \frac{F_{A0} X_A}{-r_A}$$

Rate Law for second order

$$-r_A = k C_A^2$$

Stoichiometry

$$C_A = C_{A0} (1 - X_A)$$

Combine

$$V = \frac{F_{A0} X_A}{k C_A^2} = \frac{F_{A0} X_A}{k (C_{A0}^2 (1 - X_A)^2)}$$

Determine C_{A0} using equation

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = k\tau \rightarrow C_{A0} = \frac{X}{k\tau(1-X)}$$



CSTR Solution:

$$CA_0 = \frac{0.65}{0.534 \left(\frac{L}{mol.s} \right) (1)(s)(1-0.65)} = 3.4778 \text{ (mol/L)}$$

$$V = \frac{9.86 \left(\frac{mol}{s} \right) (0.65)}{0.534 \left(\frac{L}{mol.s} \right) (3.4778) \left(\frac{mol}{L} \right) (1 - 0.65)^2}$$

$$V = 28.171 \text{ L}$$

PFR Solution

PFR Design Equation

$$V = \int \frac{F_{A0} \cdot dx_A}{-r_A}$$

Rate Law for second order

$$-r_A = kC_A^2$$

Stoichiometry

$$C_A = C_{A0} (1 - X_A)$$

Combine

$$V = F_{A0} \int_0^{0.65} \frac{dx_A}{k(C_{A0}^2 (1 - X_A)^2)}$$

Determine C_{A0} using the equation

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = k\tau \rightarrow C_{A0} = \frac{X}{k\tau(1-X)}$$

$$CA_0 = \frac{0.65}{0.534(\frac{L}{mol.s})(1)(s)(1-0.65)} = 3.4778 \text{ (mol/L)}$$

$$V = \frac{F_{A0}}{k \cdot CA_0^2} \int_0^{0.65} \frac{dx_A}{(1 - X_A)^2} \quad V = \frac{9.86}{(0.534) \cdot (3.778)^2} \int_0^{0.65} \frac{dx_A}{(1 - X_A)^2}$$

Integration:

$$V = (1.5266) \frac{1}{(1 - X)} \Big|_0^{0.65} = (1.5266) \left(\frac{1}{(1-0.65)} - \frac{1}{1-0} \right)$$

$$V = (1.5266)(2.8571-1) = 2.835 \text{ L}$$

Even though PFR Design
Equation

$$V = \int \frac{F_{A0} \cdot dx_A}{-r_A}$$

However can be used

$$V = \tau \cdot \frac{FA_0}{CA_0}$$

$$V = (1)(s) \left(\frac{9.86 \left(\frac{\text{mol}}{s} \right)}{3.4778 \left(\frac{\text{mol}}{l} \right)} \right) = 2.835 \text{ litre}$$