



SKRIPSI –TK141581

**EKSPERIMEN DAN ESTIMASI PARAMETER
KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR SISTEM LARUTAN
ELEKTROLIT CO₂-K₂CO₃-(PIPERAZINE+DEA)-H₂O**

Oleh :

VITO NAUFAL PRIYO

2311 100 133

BAGUS ARIF WISNUAJI

2311 100 146

Dosen Pembimbing :

Dr. Ir. Kuswandi, DEA

NIP. 1958 06 12 1984 03 1003

Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng

NIP. 1963 01 22 1987 01 1001

**JURUSAN TEKNIK KIMIA
FAKULTAS TEKNOLOGI INDUSTRI
INSTITUT TEKNOLOGI SEPULUH NOPEMBER
SURABAYA
2015**



FINAL PROJECT –TK141581

**EXPERIMENT AND PARAMETER ESTIMATION OF
VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA FOR ELECTROLYTE
SOLUTION OF CO₂-K₂CO₃-(PIPERAZINE+DEA)-H₂O**

Project By :

VITO NAUFAL PRIYO

2311 100 133

BAGUS ARIF WISNUAJI

2311 100 146

Advisor :

Dr. Ir. Kuswandi, DEA

NIP. 1958 06 12 1984 03 1003

Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng

NIP. 1963 01 22 1987 01 1001

**DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING
FACULTY OF INDUSTRIAL TECHNOLOGY
SEPULUH NOPEMBER INSTITUTE OF TECHNOLOGY
SURABAYA
2015**

LEMBAR PENGESAHAN

EKSPERIMEN DAN ESTIMASI PARAMETER KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR SISTEM LARUTAN ELEKTROLIT CO₂-K₂CO₃-(PIPERAZINE+DEA)-H₂O

Diajukan Untuk Memenuhi Salah Satu Syarat Memperoleh Gelar
Sarjana Teknik pada Program Studi S-1 Jurusan Teknik Kimia
Institut Teknologi Sepuluh Nopember

Oleh :

Vito Naufal Priyo
Bagus Arif Wisnuaji

NRP : 2311 100 133
NRP : 2311 100 146

Disetujui oleh Tim Penguji Tugas Akhir :

1. Dr. Ir. Kuswandi, DEA (Pembimbing I)
2. Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng (Pembimbing II)
3. Prof. Ir. Renanto, M.S. Ph.D. (Penguji I)
4. Ir. Minta Yuwana, M.S. (Penguji II)
5. Prida Novarita, S.T., M.T (Penguji III)

Surabaya
Juli, 2015



LEMBAR PENGESAHAN

EKSPERIMEN DAN ESTIMASI PARAMETER KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR SISTEM LARUTAN ELEKTROLIT CO₂-K₂CO₃-(PIPERAZINE+DEA)-H₂O

Diajukan Untuk Memenuhi Salah Satu Syarat Memperoleh Gelar
Sarjana Teknik pada Program Studi S-I Jurusan Teknik Kimia
Institut Teknologi Sepuluh Nopember

Oleh :

Vito Naufal Priyo
Bagus Arif Wisnuaji

NRP : 2311 100 133
NRP : 2311 100 146

Disetujui oleh Tim Penguji Tugas Akhir :

1. Dr. Ir. Kuswandi, DEA (Pembimbing I)
2. Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng (Pembimbing II)
3. Prof. Ir. Renanto, M.S. Ph.D. (Penguji I)
4. Ir. Minta Yuwana, M.S. (Penguji II)
5. Prida Novarita, S.T., M.T (Penguji III)

Surabaya
Juli, 2015



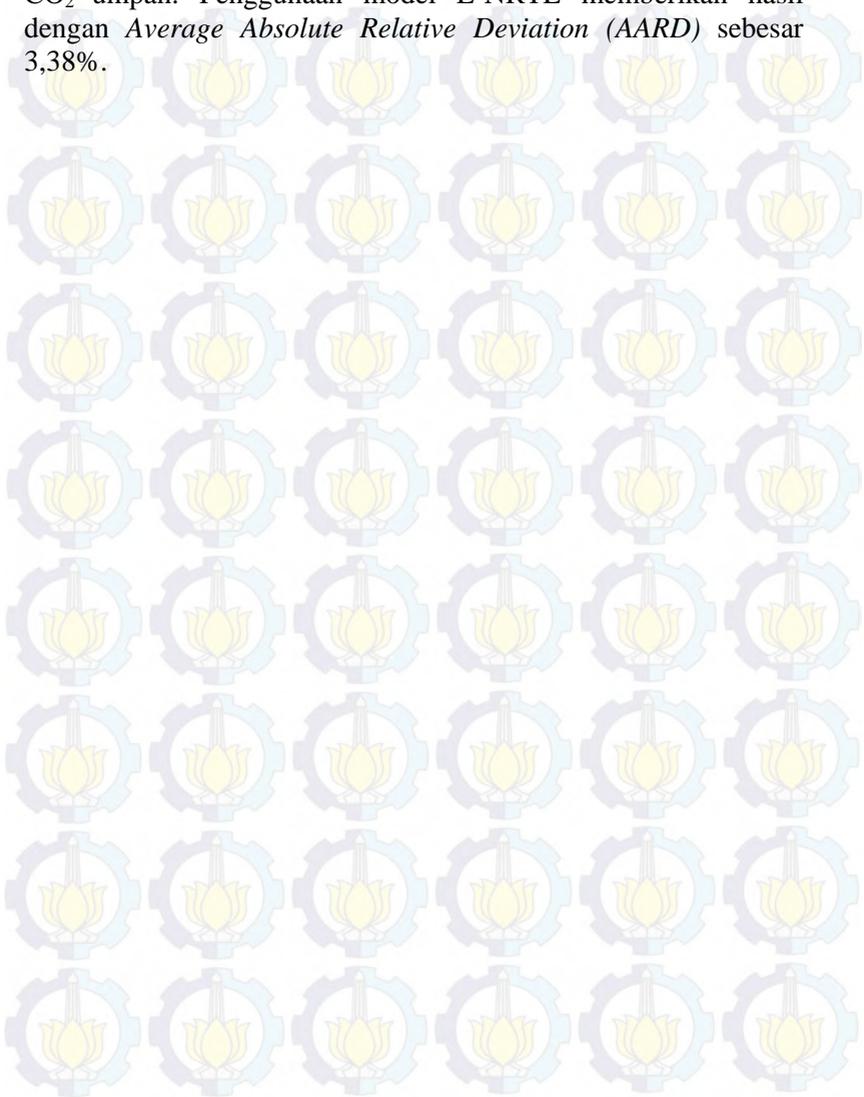
**EKSPERIMEN DAN ESTIMASI PARAMETER
KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR SISTEM
LARUTAN ELEKTROLIT CO₂-K₂CO₃-
(PIPERAZINE+DEA)-H₂O**

Nama Mahasiswa : 1) Vito Naufal Priyo (2311100133)
2) Bagus Arif Wisnuaji (2311100146)
Jurusan : Teknik Kimia, FTI-ITS
Dosen Pembimbing : Dr. Ir. Kuswandi, DEA
Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng

ABSTRAK

Proses absorpsi gas CO₂ dengan menggunakan larutan K₂CO₃ dan promotor seperti DEA dan Piperazine sangat luas dipakai di industri kimia. Data kesetimbangan fase uap-cair sistem CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O dibutuhkan untuk perancangan yang rasional dan optimal dari unit CO₂ *removal*. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan fasa uap-cair CO₂ didalam larutan K₂CO₃ dengan promotor campuran Piperazine+DEA dengan komposisi 30% K₂CO₃, variasi PZ-DEA dengan total 5% berat, dan variasi konsentrasi umpan CO₂ 5-20% pada temperatur 30-50°C. Solubilitas gas tidak dapat diukur secara langsung dalam sistem ini, karena akan terjadi reaksi antara pelarut dan gas CO₂. Metode analogi N₂O digunakan untuk mengestimasi semua properti CO₂ terhadap sistem CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O. Hasil dari eksperimen menunjukkan bahwa harga konstanta Henry yang meningkat seiring dengan kenaikan suhu yakni 3179,23-4410,41 kPa.m³/kmol. Pada konsentrasi CO₂ umpan dan promotor yang sama, kenaikan suhu operasi dapat menaikkan tekanan parsial gas CO₂ dalam larutan K₂CO₃ 30% dengan promotor PZ-DEA yakni sebesar 517,34-1462,30 Pa. Meningkatnya konsentrasi CO₂ dalam gas umpan dapat meningkatkan besarnya CO₂ *loading* rata-rata

sebesar 11,81% untuk 10% CO₂ umpan dan 36,43% untuk 20% CO₂ umpan. Penggunaan model E-NRTL memberikan hasil dengan *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* sebesar 3,38%.



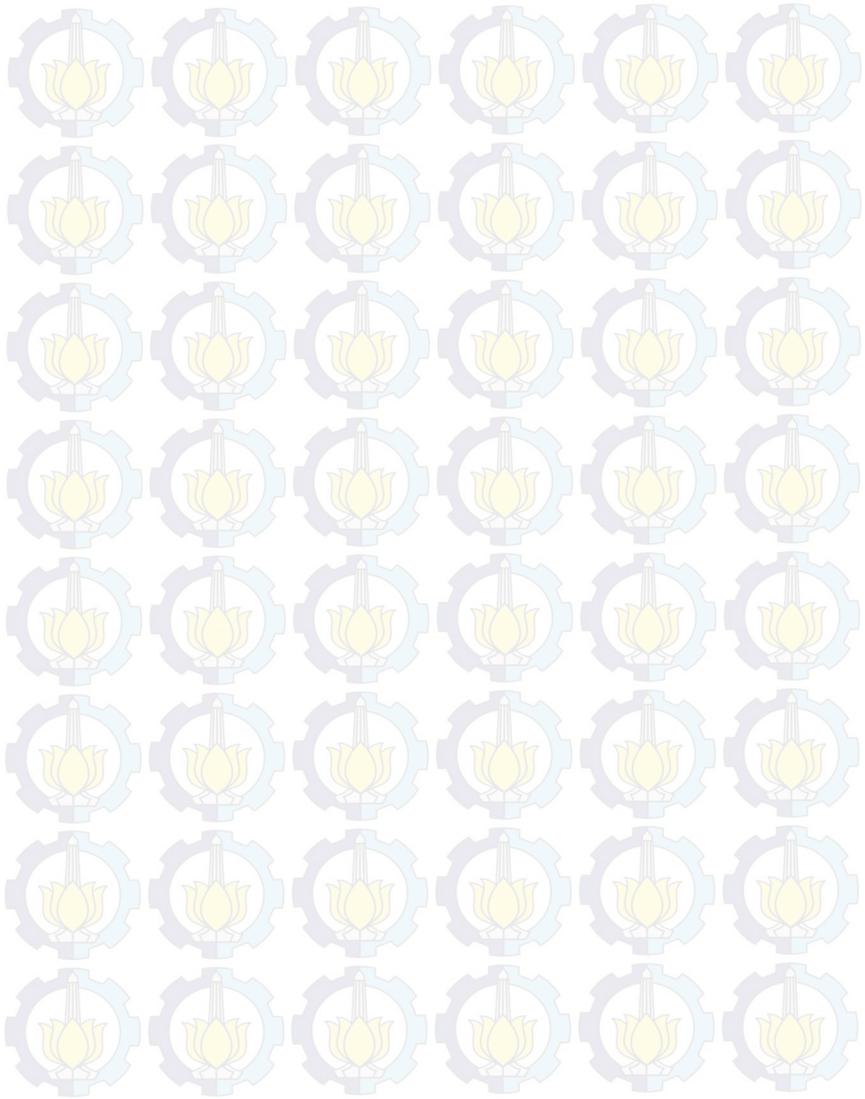
**EXPERIMENT AND PARAMETER ESTIMATION OF
VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA FOR ELECTROLYTE
SOLUTION OF CO₂-K₂CO₃- (PIPERAZINE+DEA)-H₂O**

Student's Name : 1) Vito Naufal Priyo (2311100133)
2) Bagus Arif Wisnuaji (2311100146)
Department : Chemical Engineering, FTI-ITS
Advisors : Dr. Ir. Kuswandi, DEA
Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng

ABSTRACT

The process of absorption of CO₂ by chemical reactions taking K₂CO₃ (potassium carbonate) solution and activator materials such as DEA and Piperazine is widely used in the chemical industry. Data of equilibria vapor-liquid phase CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O system needed for a rational and optimum design of CO₂ removal unit. This study aims to determine the solubility of CO₂ in the experimental solution of K₂CO₃ with a mixture promoter Piperazine+DEA mixture with a composition of 30 % K₂CO₃, variation of total 5% PZ-DEA, and variation of CO₂ concentration in feed 5-20% at a temperature of 30-50°C. Gas solubility cannot be measured directly in this system, because there will be a reaction between the solvent and gas. N₂O analogy method is used to estimate all the properties of CO₂ in CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O system. The results of this experiment show that the higher the temperature, the higher the value of Henry constant about 3179,23-4410,41 kPa.m³/kmol. At the same CO₂ feed and promotor, increasing the temperature makes partial pressure of CO₂ increase at 517,34-1462,30 Pa. The increasing of CO₂ concentration in feed can increase the amount of CO₂ loading with the average of 11,81% for 10% CO₂ and 36,43% for 20% CO₂. Using E-NRTL model gives a result with Average Absolute

Relative Deviation (AARD) about 3,38%.



KATA PENGANTAR

Segala puji dan syukur atas kehadiran Tuhan YME karena berkat Rahmat dan karunia-Nya yang telah memberi segala kemudahan dan kekuatan kepada penulis, sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan Tugas Akhir Skripsi yang berjudul "EKSPERIMEN DAN ESTIMASI PARAMETER KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR SISTEM LARUTAN ELEKTROLIT $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(PIPERAZINE+DEA)-H}_2\text{O}$ " yang merupakan salah satu syarat kelulusan bagi mahasiswa Teknik Kimia FTI-ITS Surabaya.

Keberhasilan penulisan Tugas Akhir Skripsi ini tidak lepas dari dorongan dan bimbingan dari berbagai pihak. Untuk itu dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih yang setulus-tulusnya kepada :

1. Bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA selaku Dosen Pembimbing Tugas Akhir Skripsi atas bimbingan dan saran yang telah diberikan.
2. Bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. selaku Dosen Pembimbing Tugas Akhir Skripsi dan Kepala Laboratorium Termodinamika.
3. Bapak dan Ibu Dosen Penguji atas saran yang telah diberikan.
4. Bapak Prof. Dr. Ir. Tri Widjaja, M.Eng., selaku Ketua Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember.
5. Bapak dan Ibu Dosen pengajar serta seluruh karyawan Jurusan Teknik Kimia.
6. Orang Tua dan keluarga kami yang telah banyak memberikan dukungan baik moral maupun spiritual.
7. Teman-teman seperjuangan di Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia yang mengagumkan, terima kasih untuk segala support, bantuan dan kerjasamanya.
8. Teman-teman angkatan 2011 yang telah memberikan banyak support dan bantuan.

Semua pihak yang telah membantu penyelesaian Tugas Akhir Skripsi ini yang tidak dapat disebutkan satu persatu. Semoga segala kebaikan dan keikhlasan yang telah diberikan mendapat balasan dari Tuhan YME. Penulis mengharapkan saran dan kritik yang bersifat membangun demi kesempurnaan dan untuk penelitian di masa yang akan datang.

Akhirnya, semoga tugas akhir ini dapat memberikan kontribusi yang bermanfaat bagi Penulis dan Pembaca khususnya.

Surabaya, Juli 2015
Penyusun

DAFTAR ISI

Halaman Judul	i
Lembar Pengesahan	iii
Abstrak	iv
Abstract	vi
Kata Pengantar	viii
Daftar Isi	x
Daftar Gambar	xii
Daftar Tabel	xiv
BAB I PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	5
1.3 Tujuan Penelitian	6
1.4 Manfaat Penelitian	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Metode Absorpsi	7
2.2 Kesetimbangan Fase Uap-Cair	8
2.3 Solubilitas Fisik	10
2.4 Kesetimbangan Reaksi Kimia	12
2.5 Model Elektrolit Non Random Two Liquid (E-NRTL)	14
2.6 Parameter Interaksi Pada Model ENRTL	23
2.7 Metode GRG (<i>Generalized Reduced Gradient</i>) Non Linear	24
BAB III METODOLOGI PENELITIAN	
3.1 Deskripsi Penelitian	27
3.2 Peralatan Percobaan	28
3.3 Bahan Percobaan	29
3.4 Variabel Percobaan	29
3.5 Pelaksanaan Percobaan	29
3.6 Evaluasi Data	33

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	
4.1 Validasi Peralatan Penelitian	37
4.2 Hasil Eksperimen dan Pembahasan	38
4.3 Korelasi dengan Model E-NRTL	44
BAB V KESIMPULAN	51
DAFTAR PUSTAKA	53
DAFTAR NOTASI	57
APENDIKS	59
LAMPIRAN	109

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1	Hasil Validasi Peralatan Penelitian	37
Tabel 4.2	Hasil Perhitungan CO ₂ Terabsorp	41
Tabel 4.3	Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk 0-5% PZ-DEA	45
Tabel 4.4	Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk 1-4% PZ-DEA	46
Tabel 4.5	Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk 2-3% PZ-DEA	46
Tabel 4.6	Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk 3-2% PZ-DEA	47
Tabel A.1	Perhitungan Massa Tiap Komponen Untuk 1% Massa PZ dan 4% Massa DEA	59
Tabel A.2	Perhitungan Mol N ₂ O Terabsorb %PZ dan %DEA	60
Tabel A.3	Perhitungan Mol H _{N2O} dan H _{CO2} Untuk %PZ dan %DEA	63
Tabel A.4	Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan	66
Tabel A.5	Hasil Perhitungan Konstanta Kesetimbangan Pada Analisa Awal Untuk 5% Mol CO ₂ pada suhu 40°C	67
Tabel A.6	Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan	69
Tabel A.7	Hasil Perhitungan Konstanta Kesetimbangan Pada Analisa Akhir Untuk 5% Mol CO ₂ pada suhu 40°C	70
Tabel A.8	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi di Liquid Untuk 5% Mol CO ₂ pada suhu 40°C	75
Tabel A.9	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas CO ₂ 5%	76

Tabel A.10	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas CO ₂ 5%	77
Tabel A.11	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas CO ₂ 5%	77
Tabel A.12	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas CO ₂ 5%	78
Tabel A.13	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas CO ₂ 10%	78
Tabel A.14	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas CO ₂ 10%	79
Tabel A.15	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas CO ₂ 10%	79
Tabel A.16	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas CO ₂ 10%	80
Tabel A.17	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas CO ₂ 20%	80
Tabel A.18	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas CO ₂ 20%	81
Tabel A.19	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas CO ₂ 20%	81
Tabel A.20	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas CO ₂ 20%	82
Tabel A.21	Hasil Perhitungan C _i Untuk 1% PZ 4% DEA	83
Tabel A.22	Data Nonrandomness Parameter	84

Tabel A.23	Data Konstanta Binary Interaction Parameter antar Molekul-Pasangan ion dan Pasangan Ion-Molekul untuk Sistem PZ-DEA	85
Tabel A.24	Perhitungan Binary Interaction Parameter (Molekul:CO ₂)	93
Tabel A.25	Perhitungan Binary Interaction Parameter (Molekul:H ₂ O)	94
Tabel A.26	Perhitungan Binary Interaction Parameter (Molekul:DEA)	95
Tabel A.27	Perhitungan Binary Interaction Parameter (Molekul:PZ)	96
Tabel A.28	Data Konstanta Binary Interaction Parameter antar Molekul	97
Tabel A.29	Perhitungan Binary Interaction Parameter antar Molekul	99
Tabel A.30	Perhitungan Koefisien Aktivitas H ₂ O	106



DAFTAR GAMBAR

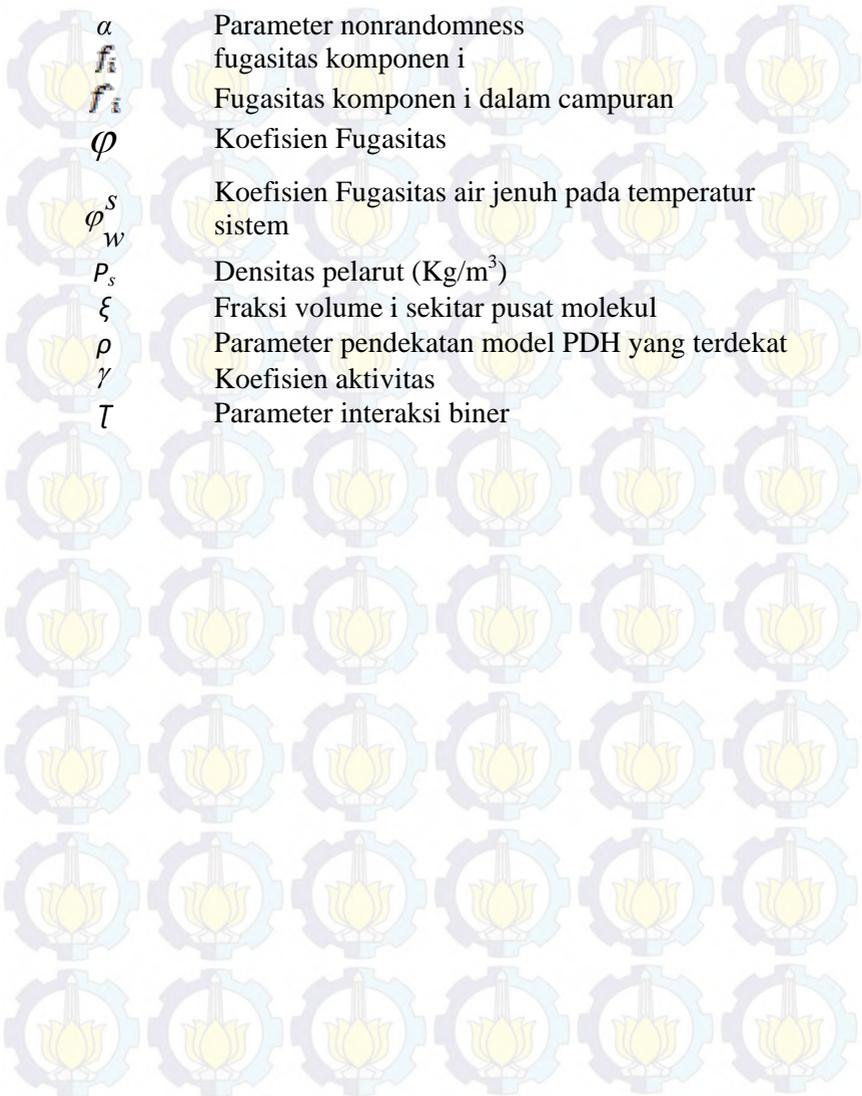
Gambar 3.1	Skema Peralatan Solubilitas CO ₂	28
Gambar 3.2	Diagram Alir Metodologi Penelitian	31
Gambar 3.3	Diagram Alir Perhitungan Parameter dengan Persamaan E-NRTL	32
Gambar 4.1	Hasil Validasi Peralatan Eksperimen	38
Gambar 4.2	Solubilitas CO ₂ pada 30% K ₂ CO ₃ dengan Promotor PZ-DEA	39
Gambar 4.3	Pengaruh Suhu terhadap CO ₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 5% CO ₂	42
Gambar 4.4	Pengaruh Suhu terhadap CO ₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 10% CO ₂	42
Gambar 4.5	Pengaruh Suhu terhadap CO ₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 5% CO ₂	43
Gambar 4.6	Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading Promotor 0-5% PZ-DEA	48
Gambar 4.7	Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading Promotor 1-4% PZ-DEA	48
Gambar 4.8	Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading Promotor 2-3% PZ-DEA	49
Gambar 4.9	Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading Promotor 3-2% PZ-DEA	49



DAFTAR NOTASI

A_{ϕ}	Parameter Debye-Huckel
C	Konsentrasi (mol/L)
D_i	Konstanta Dielektrik spesies i
D_s	Konstanta Dielektrik pelarut
D_m	Konstanta Dielektrik campuran pelarut
D_w	Konstanta Dielektrik air
e	Muatan elektron
G	Energi Gibbs
G^{ex}	Energi Gibbs ekkses
G^{id}	Energi Gibbs ideal
ΔG°	Perubahan energi Gibbs
H_{CO_2}	Konstanta Henry CO_2 di larutan
$H^{\circ}_{CO_2}$	Konstanta Henry CO_2 di air
H_{N_2O}	Konstanta Henry N_2O di larutan
$H^{\circ}_{N_2O}$	Konstanta Henry N_2O di air
ΔH°	Perubahan entalpy reaksi standard
I_x	Daya ionik
k	Konstanta Boltzmann
K	Konstanta kesetimbangan
N_0	Bilangan Avogadro
P^s_w	Tekanan uap air (Pa)
P	Tekanan total (Pa)
p	Tekanan parsial (Pa)
R	Konstanta gas ideal ($J.K^{-1}.mol^{-1}$)
T	Temperatur (K)
$\bar{v}_{m,w}^{\infty}$	Parsial molar volume <i>solute</i> m (m^3)
v_w^l	Parsial molar volume untuk air murni (m^3)
V	Volume (m^3)
x	Fraksi komponen di liquid
y	Fraksi komponen di vapor
z	Muatan ion

Huruf Latin



α	Parameter nonrandomness
f_i	fugasitas komponen i
f_i^s	Fugasitas komponen i dalam campuran
ϕ	Koefisien Fugasitas
ϕ_w^s	Koefisien Fugasitas air jenuh pada temperatur sistem
ρ_s	Densitas pelarut (Kg/m ³)
ξ	Fraksi volume i sekitar pusat molekul
ρ	Parameter pendekatan model PDH yang terdekat
γ	Koefisien aktivitas
τ	Parameter interaksi biner

BIODATA PENULIS



VITO NAUFAL PRIYO adalah anak pertama dari dua bersaudara pasangan Bapak Yuswanto dan Ibu Evie. Penulis dilahirkan di Jakarta pada tanggal 15 November 1993. Jenjang pendidikan yang ditempuh dimulai dari TK Islam Pondok Duta, SD Islam Pondok Duta, SMPN 103 Jakarta, dan SMAN 39 Jakarta. Selepas lulus SMA, penulis melanjutkan kuliah tahap sarjana di Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS)

Surabaya dan tergabung dalam angkatan 2011 (K-51). Penulis menunjukkan kegigihan dalam menempuh perkuliahan dengan semangat tinggi dan pantang menyerah. Selain aktif sebagai mahasiswa, penulis juga aktif dalam berbagai organisasi kemahasiswaan yaitu sebagai staff Competency Development Departement HIMATEKK FTI-ITS dan staff Chemical Engineering Photography (CEPOT). Dalam kegiatan akademis, penulis pernah kerja praktik di Total E&P Indonesia Balikpapan. Pada tahun terakhir perkuliahan, penulis memilih Laboratorium Termodinamika sebagai laboratorium yang menjadi spesialisasinya. Penulis menyelesaikan tugas akhir “Pra Desain Pabrik *Liquefied Natural Gas* (LNG) dari *Coal Bed Methane*” pada semester 7 dan skripsi pada semester 8 dengan judul “Eksperimen dan Estimasi Parameter Kesetimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Elektrolit $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(Piperazine+DEA)-H}_2\text{O}$ ” dengan Dosen Pembimbing Dr. Ir. Kuswandi, DEA dan Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. Penulis menerima kritik dan saran yang dapat dikirimkan lewat email: vitonaufal@gmail.com.



(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BIODATA PENULIS



Bagus Arif Wisnuaji, lahir di Denpasar pada tanggal 22 Agustus 1993, merupakan anak pertama dari pasangan bapak Bagus Nyoman Putra dan Ibu Diah Sintawati. Penulis memulai pendidikan di SD Cipta Dharma Denpasar, kemudian melanjutkan sekolah ke SMP Negeri 1 Denpasar dan SMA Negeri 4 Denpasar. Setelah lulus SMA, penulis melanjutkan kuliah tahap sarjana di Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS) Surabaya, dan tergabung dalam angkatan 2011 (K-51). Semasa kuliah, penulis juga aktif dalam kegiatan organisasi kemahasiswaan seperti staff Social Development (SOSDEV) HIMATEKK FTI-ITS dan Ketua Teknik Kimia Basketball Club (TBC). Dalam kegiatan akademis, penulis pernah kerja praktik di Total E&P Indonesia, Balikpapan pada bulan Juli-Agustus 2014. Memasuki tahun terakhir diawali dengan bergabung sebagai anggota Laboratorium Thermodinamika Teknik Kimia ITS. Penulis menyelesaikan “Pra Desain Pabrik Liquefied Natural Gas (LNG) dari Coal Bed Methane” pada semester 7 dan skripsi pada semester 8 dengan judul “Eksperimen dan Estimasi Parameter Kesetimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Elektrolit $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(Piperazine+DEA)}$ ” dengan Dosen Pembimbing bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA dan bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. Penulis sangat terbuka dalam menerima kritik dan saran, silakan menghubungi penulis lewat email: arif.bagus7@gmail.com



BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Indonesia merupakan salah satu negara penghasil gas alam papan atas di dunia. Data BP Statistics tahun 2014 menunjukkan cadangan gas alam terbukti Indonesia mencapai 103,3 TCF. Dengan angka cadangan tersebut menempatkan Indonesia berada pada posisi ke-14 pemilik cadangan terbesar di dunia. Bahkan, di kawasan Asia, Indonesia merupakan pemilik cadangan gas terbesar kedua setelah China yang memiliki 115,6 TCF. Kendati memiliki cadangan gas yang cukup besar, namun gas alam belum digunakan secara maksimal di Indonesia. Sebagian besar gas alam tersebut dijual ke pasar ekspor. Untuk konsumsi domestik, proporsi pemakaian gas alam hanya mencakup 17% dari total kebutuhan energi Indonesia. Mengacu pada tingkat produksi sekarang, cadangan gas alam Indonesia bisa bertahan untuk jangka waktu 50 tahun. Dengan tingkat cadangan yang masih melimpah dan berharga jauh lebih murah ketimbang bahan bakar minyak (BBM), salah satu solusi yang ditawarkan oleh pemerintah adalah menerapkan kebijakan konversi BBM ke gas secara masif. Langkah ini diperkirakan akan berdampak signifikan bagi pengurangan subsidi BBM yang selama ini selalu membebani anggaran negara (Dudley, 2014).

Kualitas gas alam penting untuk diperhatikan, gas alam mengandung kontaminan berupa H_2O , N_2 , Hg, CO_2 dan H_2S . Dalam hal ini, penghilangan kontaminan atau pemurnian gas alam memiliki peranan penting dalam penentuan harga produksi gas alam yang dihasilkan, sehingga dibutuhkan teknologi pemurnian gas alam yang efisien dan ekonomis. Permasalahan utama adalah kandungan CO_2 , dikarenakan CO_2 termasuk kategori gas yang bersifat asam (*acid gas*). Adanya gas CO_2 dapat menyebabkan korosi pada utilitas pabrik dan sistem perpipaannya, dikarenakan CO_2 dan uap air dalam gas alam akan

menghasilkan senyawa *Carbonic Acid* (H_2CO_3) yang sangat korosif. Disamping itu gas CO_2 dapat mengurangi nilai kalor dari gas alam, yang akan menyebabkan penurunan harga produk gas alam. Pada kilang LNG, gas CO_2 harus dihilangkan untuk mencegah pembekuan atau pembuntuan sewaktu proses pendinginan. Dalam pabrik sintesa ammonia, CO_2 harus dipisahkan dari gas proses untuk menghindari keracunan promotor sintesa ammonia. Namun demikian, gas CO_2 yang telah dipisahkan tersebut diupayakan untuk ditangkap agar dapat dimanfaatkan dan mengurangi penumpukan Gas Rumah Kaca di atmosfer yang menyebabkan pemanasan global. Namun hanya sebagian kecil saja CO_2 yang dimanfaatkan, diantaranya adalah sebagai bahan baku pembuatan urea, industri minuman berkarbonat (minuman ringan), industri logam dan karoseri sebagai pendingin pada pengelasan logam (*welding*) dan pengecoran, industri makanan sebagai media pengawetan sayuran, buah-buahan, gabah, daging dan lain-lain (*Suprpto*, 2007).

Berbagai teknologi pemisahan CO_2 secara luas telah banyak dikembangkan, diantaranya yaitu metode membran, kriogenik, adsorpsi, dan yang paling umum digunakan adalah metode absorpsi dengan larutan kimia. Membran merupakan metode pemisahan dengan menggunakan sistem semacam selaput/membran, dimana *feed* dilewatkan melalui membran tersebut. Membran merupakan filter yang sangat spesifik, dimana hanya molekul dengan ukuran tertentu saja yang dapat melewati membran, sedangkan sisanya akan tertahan di permukaan membran. Pada proses pemisahan ini tidak memerlukan zat kimia tambahan, tidak ada limbah buangan *by-product* yang dihasilkan, serta memerlukan tekanan operasi yang rendah dan umumnya bisa beroperasi pada suhu lingkungan. Namun kelemahan dari proses pemisahan ini yaitu terkadang perlu dilakukan *pretreatment feed* terlebih dahulu untuk mendapatkan *feed* yang murni. Hal ini dikarenakan membran rentan terdegradasi oleh *impurities*. Sementara kriogenik dapat dipakai untuk tekanan

parsial CO₂ yang besar, namun dengan adanya proses pendinginan, biaya yang dikeluarkan tidak sedikit. Bila digunakan untuk kandungan gas CO₂ yang rendah metode ini tidak efektif dari segi ekonomi, metode ini biasanya hanya digunakan pada aliran gas dengan kandungan CO₂ yang sangat besar. Sedangkan adsorpsi merupakan metode pemisahan CO₂ dengan menggunakan suatu adsorben yang dapat menyerap CO₂. Proses adsorpsi telah diterapkan namun kapasitas dan selektivitas yang rendah tidak berpotensi untuk pengambilan CO₂ dari aliran gas dengan baik. Apabila adsorben sudah mulai jenuh, regenerasi secara menyeluruh dan pembersihan perlu dilakukan sebelum adsorben digunakan kembali (*Suprpto, 2007*)

Metode absorpsi adalah metode pemisahan CO₂ dari aliran gas yang paling ekonomis. Absorpsi CO₂ dengan larutan kimia atau fisika adalah teknologi yang dikembangkan dengan baik dan telah diaplikasikan pada berbagai proses komersial, termasuk pemurnian gas dan produksi ammonia. Banyak penelitian telah dilakukan pada teknologi ini lebih dari 50 tahun yang lalu, terutama pada pengembangan pengetahuan terhadap spesifikasi dan karakteristik dari jenis pelarut. Sebagai contoh yang telah banyak dipublikasikan yaitu jenis pelarut seperti *amine*. Sedangkan pengembangan pengetahuan mengenai campuran pelarut yang kompleks masih sedikit dilakukan, di mana teknologi ini merupakan teknologi yang paling efektif. Salah satu proses absorpsi/stripping yang banyak dipakai dan dikembangkan adalah dengan sirkulasi larutan kimia. Proses semacam ini banyak dipakai pada produksi ammonia dan pemurnian gas alam. Sedangkan untuk proses absorpsi fisika biasanya diaplikasikan pada tekanan yang tinggi. Beberapa pelarut yang umum digunakan yaitu Selexol, Rectisol, dan Purisol. Karena pelarut fisika tidak bereaksi dengan CO₂, maka pelarut tidak terkonsumsi (tidak berkurang). Sebagai tambahan, panas absorpsi dibatasi pada *enthalpy* absorpsi fisika, yang mana nilainya jauh lebih rendah dibandingkan dengan menggunakan pelarut yang reaktif.

Proses dibatasi oleh selektivitas dan laju absorpsi yang rendah (<http://www.owl.net.rice.edu/~ceng403/co2abs.html>).

Beberapa penelitian terdahulu telah dilakukan, dimulai dari Kuswandi *et al* (2008) yang melakukan penelitian mengenai data solubilitas gas CO₂ dalam larutan Potassium Carbonat (K₂CO₃) untuk meningkatkan kinerja proses absorpsi. Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan *wetted wall column* sebagai absorber dari berbagai konsentrasi Potassium Carbonat yaitu 10, 15, 20, 25 dan 30% massa dan suhu operasi 30, 40, 50 dan 60 °C. Perhitungan estimasi menggunakan persamaan *vapour liquid equilibrium* (VLE) dan reaksi kimia dengan metode NRTL. Hasil penelitian menunjukkan penurunan jumlah mol CO₂ yang terlarut dengan naiknya suhu serta konsentrasi larutan Potassium Carbonat.

Hilliard (2008), memprediksi model termodinamika untuk larutan campuran K₂CO₃, Piperazine, dan MEA untuk mengabsorpsi CO₂. Percobaan dilakukan pada suhu 40° C dan 60° C dan campuran K₂CO₃, Piperazine, dan MEA yang bervariasi. Dari hasil percobaan didapatkan campuran 2,5 m K⁺ +7 m MEA+ 2 m PZ memiliki kapasitas diferensial tertinggi yaitu 0,17.

Winarno *et al* (2008), melakukan penelitian mengenai proses absorpsi disertai reaksi kimia gas CO₂ memakai larutan K₂CO₃ dengan promotor Diethanolamine (DEA). Penelitian ini bertujuan untuk menentukan data kesetimbangan fasa uap-cair sistem larutan elektrolit CO₂-K₂CO₃-Diethanolamine-H₂O memakai kolom absorpsi tipe *wetted wall column* (WWC) pada tekanan atmosfer. Penelitian dilakukan dengan konsentrasi larutan K₂CO₃ 30% dan DEA 2% dengan variabel suhu 30°C, 50°C, dan 70°C dan gas umpan CO₂ antara 1-7%. Hasil eksperimen menunjukkan bahwa kenaikan konsentrasi CO₂ dalam gas umpan pada temperatur konstan akan menyebabkan kenaikan CO₂ loading, penurunan kadar CO₃²⁻, kenaikan kadar HCO₃⁻, kenaikan kadar CO₂ dalam larutan, kenaikan tekanan parsial kesetimbangan CO₂ dan penurunan tekanan parsial kesetimbangan H₂O. Hasil

eksperimen juga dikorelasikan dengan model *Electrolyte Non-Random Two Liquid* (ENRTL) dengan deviasi absolut 3,5%.

Thee et al (2012), melakukan penelitian mengenai evaluasi reaksi kinetik absorpsi CO₂ kedalam larutan K₂CO₃ dengan promotor *monoethanolamine* (MEA) dibawah kondisi seperti yang terjadi pada industri CO₂ *capture plant*. Hasil yang ditunjukkan disini memperlihatkan bahwa pada 63^oC, penambahan MEA pada jumlah kecil 1,1 M (5% berat) mempercepat laju *overall* absorpsi CO₂ pada 30% berat pelarut K₂CO₃ dengan faktor 16 dan pada penambahan MEA 2,2 M (10% berat) mempercepat laju *overall* absorpsi CO₂ pada 30% berat pelarut K₂CO₃ dengan faktor 45.

Altway et al (2014), melakukan prediksi dengan pelarut K₂CO₃-MDEA-H₂O, didapatkan bahwa dengan penambahan jumlah MDEA dapat meningkatkan besarnya loading dari CO₂ dan dapat menurunkan tekanan parsial CO₂ dalam gas keluaran.

Kurniati et al (2014), dengan adanya MDEA (1%) dan DEA (0-3%) dalam larutan K₂CO₃ dapat meningkatkan konstanta Henry sehingga dengan kata lain MDEA-DEA dapat menurunkan kelarutan CO₂ dalam larutan.

Zulfetra dan Nuharani (2014), melakukan penelitian dengan pelarut K₂CO₃-MDEA-DEA dan K₂CO₃-PZ-DEA, didapatkan hasil pelarut K₂CO₃-PZ-DEA dapat mengabsorpsi gas CO₂ komposisi 20% lebih baik dibandingkan dengan pelarut K₂CO₃-MDEA-DEA. Hal ini dikarenakan pelarut K₂CO₃-PZ-DEA memiliki nilai tekanan parsial lebih kecil dibandingkan pelarut K₂CO₃-MDEA-DEA.

1.2 Perumusan Masalah

Penelitian-penelitian mengindikasikan bahwa *potassium carbonate* (K₂CO₃) mempunyai panas regenerasi yang rendah tetapi laju reaksinya lambat bila dibandingkan dengan *amine*. Beberapa penelitian telah menunjukkan bahwa penambahan promotor *amine* dapat mempercepat proses absorpsi. Adapun salah satu contoh penelitian terdahulu adalah dengan penambahan

promotor PZ (Piperazine) dan promotor DEA (*Diethanolamine*) pada larutan K_2CO_3 kemudian dikorelasikan dengan model E-NRTL. Tetapi kelemahan dari DEA yaitu produk degradasinya bersifat korosif dan juga *foaming* larutan sering terjadi pada konsentrasi DEA yang tinggi. Sedangkan kelemahan PZ adalah panas reaksinya tinggi dan harganya mahal.

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan fasa uap-cair CO_2 dalam larutan K_2CO_3 dengan promotor campuran Piperazine-DEA dalam berbagai konsentrasi *solvent*, konsentrasi gas umpan CO_2 dan suhu pada tekanan atmosferik.

1.4 Manfaat Penelitian

Data kesetimbangan fasa uap-cair CO_2 di dalam larutan K_2CO_3 dengan penambahan promotor campuran Piperazine-DEA dapat dijadikan sebagai acuan pada perancangan kolom absorpsi untuk proses mereduksi gas CO_2 pada dunia industri.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Metode Absorpsi

Absorpsi adalah suatu proses pemisahan suatu komponen fluida dari campurannya dengan menggunakan solvent atau fluida lain. Cairan yang digunakan juga umumnya tidak mudah menguap dan larut dalam gas. Sebagai contoh yang umum dipakai adalah absorpsi amonia dari campuran udara-amonia oleh air. Setelah absorpsi terjadi, campuran gas akan di-recovery dengan cara distilasi.

Terdapat beberapa hal lain yang perlu dipertimbangkan dalam pemilihan solvent, yaitu:

1. Kelarutan Gas

Kelarutan gas harus tinggi, sehingga menaikkan rate absorpsi dan mengurangi jumlah solvent yang dibutuhkan. Umumnya suatu solvent yang memiliki sifat kimia hampir sama dengan solute yang diabsorpsi akan memberikan kelarutan yang baik. Reaksi kimia antara solvent dan solute akan terjadi pada kelarutan gas yang sangat tinggi.

2. Volatilitas

Pelarut atau solvent harus memiliki tekanan uap yang rendah dimana gas saat meninggalkan suatu proses absorpsi biasanya saturated dengan solvent dan mungkin banyak yang mungkin hilang.

3. Korosivitas

Pelarut hendaknya memiliki korosivitas kecil, sehingga material konstruksi alat tidak terlalu mahal.

4. Harga pelarut harus murah, dan mudah untuk didapat.

5. Viskositas

Pelarut harus mempunyai harga viskositas yang rendah sehingga proses absorpsi berjalan cepat, pressure drop kecil pada saat pemompaan, memberikan sifat perpindahan panas

yang baik dan meningkatkan karakteristik flooding dalam menara absorpsi.

6. Hal-hal lain yang meliputi : solvent harus nontoxic, nonflammable, memiliki komposisi kimia yang stabil dan titik bekunya rendah.

2.2 Kestimbangan Fase Uap-Cair

Syarat terjadinya kesetimbangan fase pada sistem tertutup meliputi kesamaan suhu, tekanan, potensial kimia setiap komponen pada masing-masing fasa dan energi bebas Gibbs total mencapai minimum.

Potensial kimia suatu komponen ditransformasikan sebagai fugasitas komponen tersebut, yaitu :

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.1)$$

Lewis/Randal mendefinisikan fugasitas untuk larutan ideal adalah fungsi dari konsentrasi :

$$\hat{f}_i^{ideal} = x_i f_i \quad (2.2)$$

Dimana x_i adalah fraksi mol dari spesies i . Apabila larutan tidak ideal, maka faktor koreksi digunakan untuk menyatakan koefisien aktifitas γ sebagai koefisien aktivitas dari *liquid*.

$$\gamma_i = \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^{ideal}} = \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i} \quad (2.3)$$

Kesetimbangan uap-cair direpresentasikan dalam fugasitas sebagai fungsi dari konsentrasi dan tekanan. Untuk spesies i dalam campuran uap:

$$\hat{f}_i^V = y_i \phi_i P \quad (2.4)$$

Untuk spesies i dalam larutan cair:

$$\hat{f}_i^L = x_i \gamma_i f_i \quad (2.5)$$

Pada kondisi kesetimbangan maka berlaku (formulasi gamma phi VLE):

$$y_i \hat{\phi}_i P = x_i \gamma_i f_i \quad (2.6)$$

Persamaan fugasitas spesies i murni adalah:

$$f_i = \phi_i^s P_i^s \exp\left(\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.7)$$

Faktor eksponensial tersebut dikenal sebagai faktor poynting.

Substitusi persamaan (2.7) ke (2.6) maka didapat:

$$y_i \hat{\phi}_i P = x_i \gamma_i \phi_i^s P_i^s \exp\left(\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.8)$$

atau

$$y_i \Phi_i P = x_i \gamma_i P_i^s \quad (2.9)$$

dimana:

$$\Phi_i = \frac{\phi_i}{\phi_i^s} \exp\left(-\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.10)$$

Pada tekanan rendah, persamaan VLE yang lebih realistis hanya menganggap fasa uap sebagai model gas ideal dimana:

$$\hat{\phi}_i = \hat{\phi}_i^s = 1 \quad \text{dan} \quad P = P_i^s \cong 0 \quad \text{atau faktor}$$

$$\exp\left(-\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) = 1$$

Sehingga harga $\Phi_i = 1$, atau persamaan (2.9) menjadi :

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^s \quad (2.11)$$

Kondisi kesetimbangan dinyatakan dengan energi Gibbs (G) yang dimiliki sistem tersebut, perubahan energi Gibbs yang terjadi untuk semua proses irreversibel dinyatakan :

$$dG^{Tot} \leq 0 \quad (2.12)$$

Diberikan tanda pertidaksamaan di atas adalah dalam sistem tertutup pada tekanan dan temperatur tetap, apabila perubahan properti terjadi maka energi Gibbs total akan menurun. Dengan kata lain energi Gibbs akan minimal pada kondisi kesetimbangan.

Energi Gibbs total memberikan kondisi umum suatu kesetimbangan. Untuk larutan, digunakan istilah energi Gibbs eksek yang merepresentasikan penyimpangan dari larutan ideal.

$$G_i^{ex} = G_i - G_i^{ideal} \quad (2.13)$$

Dimana G_i merupakan energi Gibbs molar untuk spesies i :

$$G_i = \Gamma(T) + RT \ln \hat{f}_i \quad (2.14)$$

$\Gamma(T)$ adalah konstanta integrasi.

Substitusi Persamaan (2.14) ke Persamaan (2.13) dan menggabungkan dengan aturan *Lewis/Randal* maka diperoleh :

$$G_i^{ex} = RT \ln \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i} = RT \ln \gamma_i \quad (2.15)$$

2.3 Solubilitas Fisik

Solubilitas fisik adalah kesetimbangan antara molekul CO_2 gas dan molekul CO_2 larutan aqueous *amine* :



Hal ini dapat dinyatakan dengan hukum Henry.

Hukum Henry ini dapat diterapkan untuk menghubungkan konsentrasi kesetimbangan gas dalam liquid sebagai fungsi

tekanan parsialnya dalam fase gas. Solubilitas memiliki berbagai definisi, tetapi definisi yang digunakan yaitu:

$$H_A = \frac{P_A}{C_A^*} \quad (2.16)$$

Dimana C_A^* konsentrasi kesetimbangan gas yang dapat dihitung dari mol gas total yang secara fisik terserap dalam volume liquid pengabsorb.

Dalam kesetimbangan gas-cair hukum Henry dinyatakan :

$$P_{CO_2} \phi_{CO_2} = H_{CO_2} \gamma_{CO_2}^* x_{CO_2} \quad (2.17)$$

Dimana P adalah tekanan sistem, y_{CO_2} adalah fraksi mol CO_2 dalam fase gas, ϕ_{CO_2} koefisien fugasitas dalam fase gas, H_{CO_2} konstanta hukum Henry CO_2 dalam solven campuran air dan amine, x_{CO_2} fraksi mol CO_2 kesetimbangan dalam fase liquid, dan $\gamma_{CO_2}^*$ koefisien aktivitas unsimetris CO_2 dalam campuran air dan amine.

Sebagai *reference state* digunakan pengenceran tak berhingga dalam air sehingga $\gamma_{CO_2}^* \rightarrow 1$, dan konstanta Henry untuk air murni adalah :

$$H_{CO_2}^w = \frac{P_{CO_2}}{x_{CO_2}} \quad (2.18)$$

Koefisien aktifitas dalam campuran *solvent* dinyatakan :

$$\gamma_{CO_2}^* = \frac{H_{CO_2}}{H_{CO_2}^w} \quad (2.19)$$

Konstanta Henry CO_2 dalam campuran *solvent* dicari dari data kelarutan CO_2 (eksperimen), sedangkan konstanta Henry CO_2 dalam air murni ditentukan dari persamaan korelasi sebagai berikut (*Austgen et al, 1991*) :

$$\ln H_{CO_2}^w = 170,7126 - 8477,711/T - 21,95743 \ln T + 0,005781T \quad (2.20)$$

konstanta Henry dalam satuan Paskal, T adalah temperatur sistem dalam Kelvin.

Pengukuran solubilitas CO₂ tidak dapat dilakukan langsung dalam pelarut amine, karena reaksi antara CO₂ dan amine mungkin dapat mempengaruhi keakuratan data. Umumnya, solubilitas CO₂ secara fisik ditentukan dengan menggunakan metode analogi N₂O sebagaimana yang dilakukan oleh Clarke (1964). Jadi setelah solubilitas N₂O didapatkan secara eksperimen, solubilitas N₂O dapat dihitung dengan :

$$\frac{H_{CO_2,amine}}{H_{N_2O,amine}} = \frac{H_{CO_2,water}}{H_{N_2O,water}} \quad (2.21)$$

Berdasarkan studi yang dilakukan oleh Versteeg dan Swaaij (1988), diperoleh dua persamaan untuk solubilitas CO₂ dan N₂O dalam air.

$$H_{N_2O,water} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (8.5470 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2284}{T}\right) \quad (2.22)$$

$$H_{CO_2,water} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (2.8249 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2044}{T}\right) \quad (2.23)$$

2.4 Kestimbangan Reaksi Kimia

Permasalahan dalam menentukan komposisi kesetimbangan pada sistem reaktif membutuhkan sebuah kondisi dan informasi spesifik mengenai komponen yang ada dalam sistem tertutup. Konstanta kesetimbangan untuk tiap-tiap reaksi dalam sistem tertutup diberikan oleh *Smith et al* (2001), yaitu :

$$K = \prod_i (x_i \gamma_i)^{v_i} = \exp\left(\frac{-\Delta G^o}{RT}\right) \quad (2.24)$$

Sedangkan hubungan ΔG° dan ΔH° diberikan oleh persamaan :

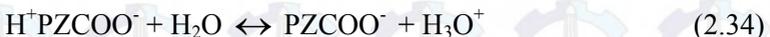
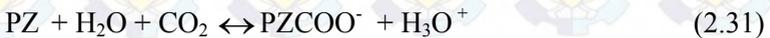
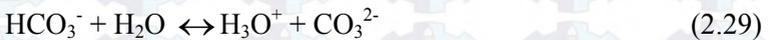
$$\Delta H^\circ = -RT^2 \frac{d(\Delta G^\circ / RT)}{dT} \quad (2.25)$$

ΔH° merupakan perubahan *enthalpy* reaksi standart.

Kombinasi Persamaan (2.24) dan Persamaan (2.25) :

$$\int d(\ln K) = \int \frac{\Delta H^\circ}{RT^2} dT \quad (2.26)$$

Di dalam sistem larutan $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-PZ-DEA-H}_2\text{O}$ terjadi kesetimbangan reaksi kimia sebagai berikut (Ma Xiaoguang, 2010) :





Pada larutan Potassium Karbonat encer, gas CO₂ bereaksi dengan prinsip mekanisme reaksi asam basa berpenyanga dengan senyawa *alkanolamine* dimana reaksi kesetimbangannya dapat dituliskan sebagai reaksi disosiasi kimia. Untuk molekular *solute* CO₂, kesetimbangan fisika diekspresikan oleh :

$$y_m \varphi_m P = x_m \gamma_m^* H_{m,w}^{(P_w^s)} \exp \frac{\bar{v}_{m,w}^\infty (P - P_w^s)}{RT} \quad (2.37)$$

Di mana $H_{m,w}^{(P_w^s)}$ adalah konstanta *Henry solute* dalam air pada temperatur sistem, φ_m koefisien fugasitas, P tekanan sistem, P_w^s tekanan uap pada air murni pada temperatur sistem T, dan $\bar{v}_{m,w}^\infty$ adalah parsial molar volume untuk molekular *solute* m pada pelarutan tak berhingga dalam air.

Untuk air, VLE diekspresikan oleh :

$$y_{\text{H}_2\text{O}} \varphi_{\text{H}_2\text{O}} P = x_{\text{H}_2\text{O}} \gamma_{\text{H}_2\text{O}}^s P_w^s \exp \frac{v_w^l (P - P_w^s)}{RT} \quad (2.38)$$

Di mana φ_w^s adalah koefisien fugasitas untuk air jenuh pada temperatur sistem dan v_w^l molar volume untuk air murni pada temperatur sistem.

Molar volume air murni dapat dicari dengan cara massa molekul relatif dari air murni dibagi dengan densitasnya, sedangkan tekanan uap *saturated* dari air murni diperoleh dari persamaan *Antoine*.

2.5 Model Elektrolit Non Random Two Liquid (E-NRTL)

Secara umum energi Gibbs eksep pada model E-NRTL merupakan gabungan dari dua faktor yaitu *long range* (LR) *forces*

dan *short range* (SR) *forces*. Pada larutan encer dimana jarak antar molekul cukup jauh maka energi Gibbs eksese didominasi oleh interaksi LR *force*. Sedangkan pada larutan pekat dimana jarak antar molekul lebih dekat maka energi Gibbs eksese didominasi oleh interaksi SR *force*.

Austgen et al (1989) mengembangkan model elektrolit NRTL yang dalam hal ini terdiri dari tiga kontribusi. Pertama, *Long Range force* terdiri dari dua kontribusi yaitu model PDH (Pitzer-Debye-Huckel) yang menghitung adanya kontribusi elektrostatis antar semua ion. Kontribusi kedua yaitu kontribusi *ion-reference-state-transfer* yang dinyatakan dengan, model persamaan Born. Ketiga adalah kontribusi *short range* yang dinyatakan dengan persamaan *local composition* elektrolit NRTL yang menghitung adanya interaksi *short range* semua spesies.

Total kontribusi terhadap energi Gibbs eksese adalah:

$$\frac{g_i^{ex*}}{RT} = \frac{g_{LR,i}^{ex*}}{RT} + \frac{g_{SR,i}^{ex*}}{RT} = \left(\frac{g_{PDH,i}^{ex*}}{RT} + \frac{g_{Born,i}^{ex*}}{RT} \right) + \frac{g_{lc,i}^{ex*}}{RT} \quad (2.39)$$

Atau

$$\ln \gamma_i = (\ln \gamma_{PDH,i} + \ln \gamma_{Born,i}) + \ln \gamma_{lc,i} \quad (2.40)$$

2.5.1 Long Range Forces

Model Pitzer-Debye-Huckel adalah ekspresi untuk energi Gibbs eksese, dimana nilai fraksi mol adalah satu untuk pelarut dan nol untuk ion-ion. Model Pitzer-Debye-Huckel ini merepresentasikan energi Gibbs eksese sebagai:

$$g_{PDH}^{ex*} = -RT \left(\sum_k x_k \right) \left(\frac{1000}{MW} \right)^{0.5} \left(\frac{4A_\phi I_x}{\rho} \right) \ln(1 + \rho I_x^{0.5}) \quad (2.41)$$

dimana:

x = fraksi mol

MW = berat molekul dari pelarut

ρ = parameter pendekatan model PDH yang terdekat
 I_x = Daya ionik yang dinyatakan dalam fraksi mol dan muatan z

$$I_x = \frac{1}{2} \sum_i x_i z_i^2 \quad (2.42)$$

Tanda (*) merujuk pada energi Gibbs eksers tak simetris.

Parameter Debye-Huckel, A_ϕ didapat dari :

$$A_\phi = \frac{1}{3} \left(\frac{2\pi N_0 \rho_s}{1000} \right)^{0.5} \left(\frac{e^2}{D_s kT} \right)^{1.5} \quad (2.43)$$

dimana:

N_0 = bilangan Avogadro (6.02×10^{23})
 ρ_s = densitas pelarut
 e = muatan elektron (1.6×10^{-19} Coulomb)
 D_s = konstanta dielektrik pelarut
 k = konstanta Boltzmann (1.38×10^{-23} J/K)

Konstanta dielektrik dri pelarut dihitung sebagai :

$$D_s = \sum_i x_i D_i \quad (2.44)$$

dimana:

x_i = fraksi massa spesies i
 D_i = konstanta dielektrik spesies i

2.5.2 Persamaan Born

Pada pelarut campuran, kondisi acuan untuk ion-ion menjadi kacau karena perubahan konstanta dielektrik. Persamaan Born diperkenalkan untuk kontribusi long-range terhadap energi Gibbs guna mempertahankan kondisi acuan pada pengenceran tak berhingga dengan air untuk ion-ion tersebut. Bentuk persamaannya adalah :

$$g_{Born}^{ex} = RT \left(\frac{e^2}{2kT} \right) \left(\sum_i \frac{x_i z_i^2}{r_i} \right) \left(\frac{1}{D_m} - \frac{1}{D_w} \right)^{1/2} \times 10^{-2} \quad (2.45)$$

Dimana D_m dan D_w masing-masing adalah konstanta dielektrik campuran pelarut dan air. Koreksi ini menentukan perbedaan energi Gibbs diantara ion-ion dalam campuran pelarut dan dalam air.

2.5.3 NRTL Term Sebagai Kontribusi Local Composition

Saat larutan menjadi lebih pekat, term yang mendeskripsikan interaksi diantara spesies netral dan spesies ionik dan spesies netral dan spesies netral menjadi penting. Interaksi tersebut digambarkan secara lokal, ataiu *short-range forces*. Wilson (1964) menurunkan persamaan untuk energi pencampuran non-elektrolit. Dasar penurunan adalah distribusi molekul i dan j , di sekitar pusat molekul i , diberikan oleh :

$$\frac{x_{ij}}{x_{ii}} = \frac{x_j \exp\left(-\frac{g_{ji}}{RT}\right)}{x_k \exp\left(-\frac{g_{ii}}{RT}\right)} \quad (2.46)$$

Renon dan Praunitz (1968) merumuskan ulang persamaan di atas dalam model NRTL, hingga pada modifikasi distribusi molekuler untuk menghitung pencampuran *non-random* :

$$\frac{x_{ij}}{x_{ii}} = \frac{x_j \exp\left(-\alpha_{ij} \frac{g_{ji}}{RT}\right)}{x_i \exp\left(-\alpha_{ij} \frac{g_{ii}}{RT}\right)} \quad (2.47)$$

α adalah parameter variabel. Nilainya berkisar antara 0,1 hingga 0,4 tergantung dari molekul dan molekul dan pelarut dalam sistem (Cullinane, 2004). Penambahan parameter non-random α , memperluas aplikasi model NRTL.

Baik antara model Wilson dan NRTL, keduanya menggunakan persamaan energi Gibbs bebas pencampuran dalam bentuk :

$$\frac{g^M}{RT} = \sum_i x_i \ln \xi_i \quad (2.48)$$

Dimana ξ adalah fraksi volume i sekitar pusat molekul. Fraksi volume diturunkan dari distribusi molekuler yang diberikan di atas dan dapat ditulis :

$$\xi_i = \frac{x_i V_i \exp\left(-\frac{g_{ij}}{RT}\right)}{\sum_j x_j V_j \exp\left(-\frac{g_{ij}}{RT}\right)} \quad (2.49)$$

Dimana V menunjukkan volume molar. Energi dari pencampuran dihubungkan dengan energi Gibbs eksres melalui eksres melalui persamaan:

$$\frac{g^{ex}}{RT} = \frac{g^M}{RT} - \sum_i x_i \ln x_i \quad (2.50)$$

Pengembangan persamaan ini dilakukan oleh Chen et al (1986) mengembangkan persamaan ini untuk larutan multi-komponen dari spesies netral maupun ionik. Pengembangan model ini oleh Chen, menggabungkan tiga sel atau grup yang berbeda dari interaksi ion dan molekul, dengan membuat 2 asumsi untuk gambaran fisik dari interaksi spesies:

1. Dua sel termasuk pusat kation, c atau pusat anion, a , dan diasumsikan mengalami saling tolakutnuk ion sejenis. Ini berarti pusat ion dikelilingi oleh molekul dan ion yang berbeda muatan.
2. Satu sel terdiri dari sebuah pusat molekul lokal, m , dengan muatan netral, yaitu muatan sekitar pusat molekul sama dengan nol.

Interaksi antar sel dapat didefinisikan sebagai interaksi dua spesies. Energi Gibbs dapat dimodelkan sebagai fungsi dari interaksi model berikut :

$$\tau_{ji,ki} = \frac{G_{ji} - G_{ki}}{RT} \quad (2.51)$$

Dalam sistem elektrolit, semua komponen dapat dikategorikan dalam tiga tipe :

- a. Spesies molekuler (m) : solute dan solvent
- b. Spesies *cationic* (c) : kation
- c. Spesies *anionic* (a) : anion

Sebuah model global dapat disusun sebagai jumlah ineteraksi spesifik spesies pada komposisi rerata larutan. Sehingga energi Gibbs ekkses dari *local interaction* dapat diprediksi dari model NRTL sebagai berikut :

$$\frac{G_{lc}^{ex}}{RT} = \sum_m \left(X_m \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c X_c \left(\sum_{a'} \left(\frac{X_{a'} \sum_j G_{jc,a'c} \tau_{jc,a'c}}{\sum_a X_a \sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) + \sum_a X_a \left(\sum_{c'} \left(\frac{X_{c'} \sum_j G_{ja,c'a} \tau_{ja,c'a}}{\sum_c X_c \sum_k X_k G_{ka,c'a}} \right) \right) \right) \quad (2.52)$$

$$X_j = C_j x_j \quad ; \quad j = m, c, a \quad (2.53)$$

$$x_j = \frac{n_j}{\sum_j n_j} \quad (2.54)$$

$$G_{ja,c'a} = \exp(-\alpha_{ja,c'a} \tau_{ja,c'a}) \quad (2.55)$$

$$G_{jc,a'c} = \exp(-\alpha_{jc,a'c} \tau_{jc,a'c}) \quad (2.56)$$

$$G_{jm} = \exp(-\alpha_{im} \tau_{im}) \quad (2.57)$$

dimana :

$$X_j = x_j C_j ;$$

($C_j = Z_j$ untuk ion-ion dan sama dengan 1 untuk molekul)

α = parameter nonrandomness

τ = parameter interaksi biner

Koefisien aktivitas untuk masing-masing komponen dapat dihitung sebagai berikut :

$$\begin{aligned} \ln \gamma_m^{lc} = & \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} - \sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \left(\tau_{mm'} - \frac{\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \right) \\ & + \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \left(\tau_{mc,ac} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \right) \\ & + \sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \left(\tau_{ma,ca} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \right) \end{aligned} \quad (2.58)$$

Untuk spesies kation :

$$\begin{aligned} \frac{1}{z_c} \ln \gamma_c^{lc} = & \sum_a Y_a \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} + \sum_m \frac{X_m G_{cm}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{cm} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) \\ & + \sum_a \sum_{c'} \frac{Y_{c'} X_a G_{ca,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'ac}} \left(\tau_{ca,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{km,c'a} \tau_{km,c'a}}{\sum_k X_k G_{km,c'a}} \right) \end{aligned} \quad (2.59)$$

Untuk spesies anion :

$$\frac{1}{z_a} \ln \gamma_a^{lc} = \sum_c Y_{aca} \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} + \sum_m \frac{X_m G_{am}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{am} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c \sum_{a'} \frac{Y_{a'} X_c G_{ac,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \left(\tau_{ac,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) \quad (2.60)$$

Dari persamaan (2.52)-(2.60) dibutuhkan parameter-parameter sebagai berikut :

Nonrandomness parameter

$$\alpha_{mm'} = \alpha_{m'm'}, \alpha_{m,cm} = \alpha_{cm,m}, \alpha_{ca,ca'} = \alpha_{ca'ca}, \alpha_{ca,c'a} = \alpha_{c'a,ca}, \alpha_{cm}, \alpha_{am}, \alpha_{mc,ac}, \alpha_{ma,ca}$$

Binary interaction parameter

$$\tau_{mm'}, \tau_{m'm'}, \tau_{m,ca}, \tau_{ca,m}, \tau_{ca,ca'}, \tau_{ca'ca}, \tau_{ca,c'a}, \tau_{c'a,ca}, \tau_{cm}, \tau_{am}, \tau_{mc,ac}, \tau_{ma,ca}$$

Binary interaction parameter dihitung dari model binary parameter yang telah disesuaikan. Dan, dapat dihitung sebagai berikut :

$$\alpha_{cm} = \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \quad (2.61)$$

$$\alpha_{am} = \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \quad (2.62)$$

Jumlah fraksi komposisi muatan anion, Y_a , dan jumlah fraksi komposisi muatan kation, Y_c , dapat dihitung sebagai berikut :

$$Y_a = \frac{X_a}{\sum_a X_{a'}} \quad (2.63)$$

$$Y_c = \frac{X_c}{\sum_c X_{c'}} \quad (2.64)$$

Kemudian, G_{cm} dan G_{am} dapat dihitung sebagai berikut :

$$G_{cm} = \sum_a Y_a G_{ca,m} \quad (2.65)$$

$$G_{am} = \sum_c Y_c G_{ca,m} \quad (2.66)$$

Kemudian, τ_{cm} dan τ_{am} dapat dihitung sebagai berikut :

$$\tau_{cm} = -\frac{\ln(G_{cm})}{\alpha_{cm}} \quad (2.67)$$

$$\tau_{am} = -\frac{\ln(G_{am})}{\alpha_{am}} \quad (2.68)$$

Selanjutnya dapat dihitung parameter-parameter yang lain sebagai berikut :

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm} \quad (2.69)$$

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am} \quad (2.70)$$

$$\tau_{ma,ca} = \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (2.71)$$

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (2.72)$$

$$G_{mc,ac} = \exp(\alpha_{mc,ac} \tau_{mc,ac}) = \exp(\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \quad (2.73)$$

$$G_{ma,ca} = \exp(\alpha_{ma,ca} \tau_{ma,ca}) = \exp(\alpha_{am} \tau_{ma,ca}) \quad (2.74)$$

Kondisi acuan kontribusi NRTL dapat dikonversikan ke bentuk asimetri dengan koreksi terhadap koefisien aktivitas pelarutan tak berhingga.

$$g_{NRTL}^{ex} = \frac{g_{NRTL}^{ex}}{RT} + \left(\sum_{m \neq w} x_m \ln \gamma_m^\infty + \sum_c x_c \ln \gamma_c^\infty + \sum_a x_a \ln \gamma_a^\infty \right) \quad (2.75)$$

$$\ln \gamma_m^\infty = \tau_{wm} + G_{mw} \tau_{mw} \quad (2.76)$$

$$\ln \gamma_c^\infty = Z_c \left(G_{cw} \tau_{cw} + \frac{\sum_{a'} x_{a'} \tau_{wc,a'c}}{\sum_{a''} x_{a''}} \right) \quad (2.77)$$

$$\ln \gamma_a^\infty = Z_a \left(G_{aw} \tau_{aw} + \frac{\sum_{c'} x_{c'} \tau_{wa'a'}}{\sum_{c''} x_{c''}} \right) \quad (2.78)$$

Subskrip w menunjukkan air.

2.6 Parameter Interaksi Pada Model E-NRTL

Ada tiga jenis parameter interaksi biner dalam kontribusi NRTL untuk energi Gibbs eksese yaitu, molekul-molekul, molekul-pasangan ion, pasangan ion-pasangan ion (anion-kation). Parameter interaksi molekul-molekul T dinyatakan dengan persamaan :

$$\tau = A + B/T(K) \quad (2.79)$$

Parameter interaksi untuk molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul sesuai persamaan berikut :

$$\tau = A + B \left(\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353.15(K)} \right) \quad (2.80)$$

Nilai faktor *non-randomness* NRTL adalah 0,2 untuk molekul-molekul, air-pasangan-ion dan pasangan ion-air (Liu, 1999). Sedangkan untuk pasangan amine-ion adalah 0,1. Interaksi antar pasangan ion pada umumnya tidak signifikan dan tidak dimasukkan dalam model ini.

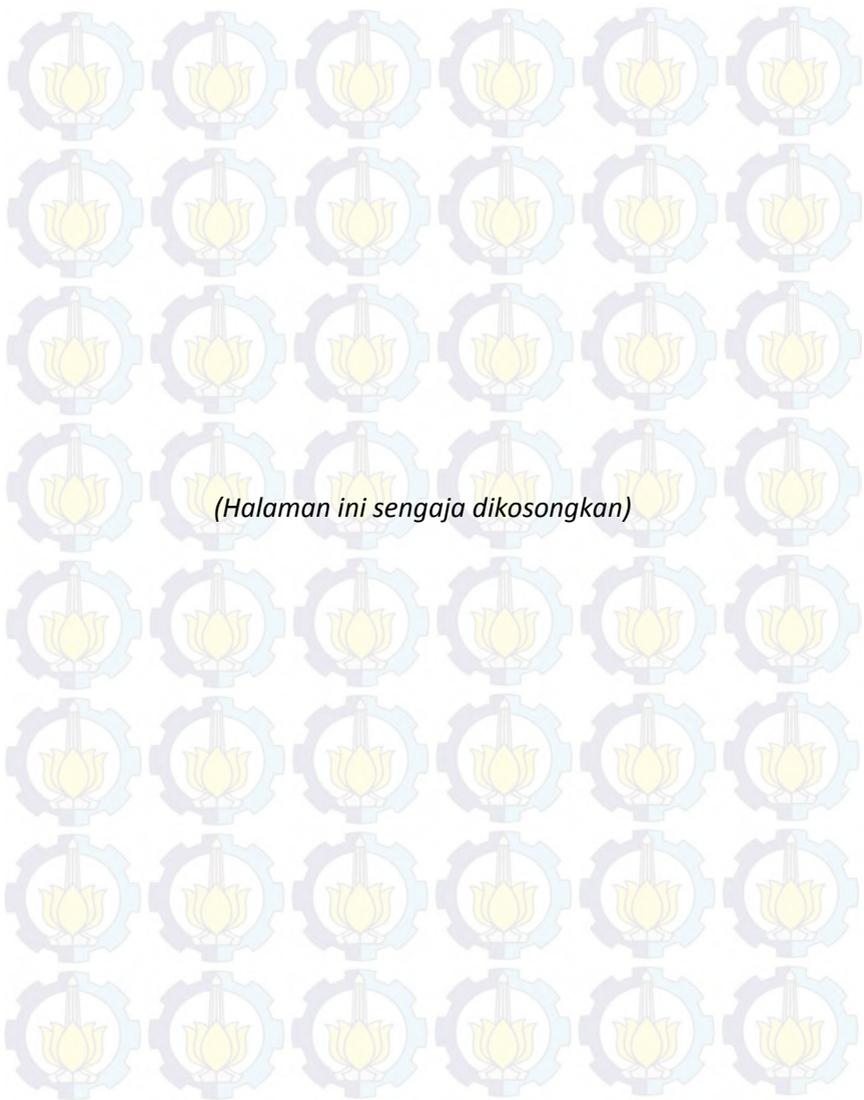
2.7 Metode GRG (*Generalized Reduced Gradient*) Non Linear

Arora (2012) menjelaskan metode *reduced gradient* berdasarkan teknik eliminasi variabel sederhana untuk permasalahan dengan constrain berupa persamaan. Metode *Generalized Reduced Gradient* merupakan perluasan metode *reduced gradient* untuk menangani permasalahan dengan constrain berupa pertidaksamaan nonlinear. Algoritma metode GRG Untuk meminimalkan fungsi $f(x)$, $x=[x_1, x_2, \dots, x_n]$ dengan constrain $h_k(x)=0$, $k=1,2, \dots, K$, adalah sebagai berikut:

1. Tentukan nilai awal x^0 dan search parameter α^0 , serta error ε dan reduction parameter γ , $0 < \gamma < 1$.
2. Bagi x menjadi \hat{x} (basic variable) dan \bar{x} (non-basic variable), dengan ketentuan jumlah non-basic variable merupakan selisih antara jumlah total variabel dengan jumlah persamaan constrain
3. Hitung nilai turunan $\nabla \bar{f}(x^{(t)})$ dan $\nabla \hat{f}(x^{(t)})$
4. Hitung nilai $C = [\nabla_1 \bar{h}_k; \nabla_2 \bar{h}_k; \dots; \nabla_K \bar{h}_k]$ dan $J = [\nabla_1 \hat{h}_k; \nabla_2 \hat{h}_k; \dots; \nabla_K \hat{h}_k]$
5. Hitung $\nabla \tilde{f}(x^{(t)}) = \nabla \bar{f}(x^{(t)}) - \nabla \hat{f}(x^{(t)}) J^{-1} C$
6. If $\|\nabla \tilde{f}(x^{(t)})\| \leq \varepsilon$, berhenti. Jika tidak, tetapkan $\bar{d} = -(\nabla \tilde{f})^T$, $\hat{d} = -J^{-1} C \bar{d}$, dan $d = (\hat{d}, \bar{d})^T$
7. Tetapkan search parameter $\alpha = \alpha^0$
8. Untuk $i=1,2,3, \dots$:
 - a. Hitung $v^{(i)} = x^{(t)} + \alpha d$. Jika $|h_k(v^{(i)})| \leq \varepsilon$, $k=1,2, \dots, K$, lanjut ke (d). Jika tidak, lanjutkan.
 - b. $\hat{v}^{(i+1)} = \hat{v}^{(i)} - J^{-1} v^{(i)} \cdot h(v^{(i)})$ dan $\bar{v}^{(i+1)} = \bar{v}^{(i)}$

- c. Jika $\|\hat{v}^{(i+1)} - \hat{v}^{(i)}\| > \varepsilon$, kembali ke (b). Jika tidak, jika $h_k(v^{(i)}) \leq \varepsilon$, $k=1,2,\dots,K$, lanjut ke langkah (d), jika tidak, $\alpha = \alpha\gamma$ dan kembali ke langkah (a)
- d. Jika $f(x^{(i)}) \leq f(v^{(i)})$, $\alpha = \alpha\gamma$ dan kembali ke langkah (a). Jika tidak, $x^{(i+1)} = v^{(i)}$ dan kembali ke tahap (2).





BAB III METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Deskripsi Penelitian

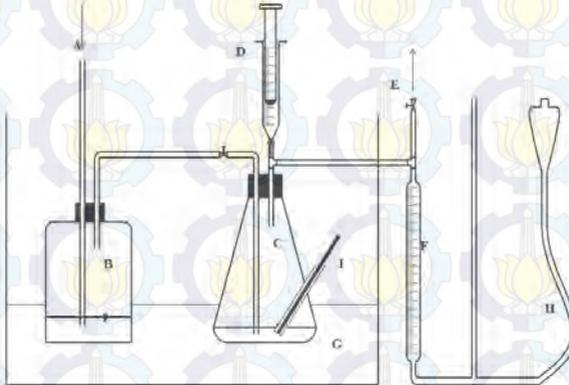
Penelitian ini dilakukan untuk mendapatkan data kesetimbangan fasa uap-cair gas CO_2 dalam sistem K_2CO_3 - $(\text{PZ}+\text{DEA})\text{-H}_2\text{O}$ pada tekanan atmosfer dan suhu 30°C , 40°C dan 50°C dalam berbagai konsentrasi promotor Piperazine-DEA dan berbagai konsentrasi gas CO_2 . Data kesetimbangan fasa uap-cair ini dapat dijadikan sebagai acuan pada perancangan kolom absorpsi untuk proses mereduksi gas CO_2 pada dunia industri dalam menentukan kinetika reaksi dengan *amine* atau memprediksi rate absorpsi gas menggunakan model.

Semua sifat ini tidak selalu dapat diukur secara langsung dengan metode eksperimen karena gas akan terjadi reaksi kimia dengan *solvent*nya. Clarke (1964) dalam penelitiannya mengatakan adanya kemiripan struktur molekul dan parameter interaksi molekular antara CO_2 dan N_2O . Clarke (1964) mengasumsi bahwa rasio solubilitas CO_2 dan N_2O dalam air dan dalam larutan encer dari solven organik mendekati 5% pada temperatur sama, hal ini berarti ratio $\text{H}_{\text{CO}_2}/\text{H}_{\text{N}_2\text{O}}$ dalam air dan larutan dengan konsentrasi *amine* yang berbeda dianggap konstan pada temperatur konstan.

Metode penelitian yang akan dilakukan terdiri dari beberapa langkah, yakni langkah pertama melakukan eksperimen dengan menggunakan gas N_2O untuk memperoleh nilai konstanta Henry CO_2 . Langkah kedua, melakukan eksperimen dengan menggunakan gas CO_2 , dan dapat diperoleh nilai tekanan parsial CO_2 . Langkah terakhir melakukan korelasi dengan model E-NRTL.

3.2 Peralatan Percobaan

Peralatan yang digunakan dalam percobaan ini didasarkan pada peralatan yang digunakan dalam eksperimen Haimour and Sandall (1984) yang dimodifikasi. Skema alat dapat dilihat pada gambar 3.1. Prinsip kerja dari metode ini yaitu mengkontakkan volume tertentu suatu *liquid* dengan sejumlah gas pada temperatur dan tekanan konstan. Kesetimbangan bisa dicapai dengan adanya pengadukan hingga waktu tertentu sampai tercatat tidak ada perubahan dalam volume gas. Perubahan pada volume gas menyatakan bahwa ada sejumlah gas yang terlarut dalam *liquid*.



Gambar 3.1 Skema Peralatan Solubilitas CO₂

Keterangan :

- A. Gas CO₂
- B. Saturation Flask
- C. Absorption Flask
- D. Injeksi Liquid
- E. Ke udara luar
- F. Buret 50 mL
- G. Waterbath shaker
- H. Movable barometric leg
- I. Termometer

3.3 Bahan Percobaan

Bahan-bahan utama yang digunakan dalam percobaan :

1. Gas Carbon Dioxide (CO₂) 5, 10, 20 % CO₂
2. Gas Nitrogen Oxide (N₂O) ≥ 99 %
3. Potassium Karbonat (K₂CO₃)
4. Diethanolamine (DEA) ≥ 98 % Sigma-Aldrich
5. Piperazine (PZ) ≥ 99 % MERCK
6. Hydrogen Chloride 3 N (HCl)
7. Metil Orange (MO)
8. Phenolphthaline (PP)

3.4 Variabel Percobaan

Variabel dalam percobaan ini adalah:

1. Temperatur : 30, 40, 50°C
2. Komposisi larutan PZ-DEA : 5% total campuran
3. Konsentrasi gas umpan CO₂ : 5, 10, 20%

3.5 Pelaksanaan Percobaan

3.5.1 Persiapan Percobaan

Larutan *amine* disiapkan terlebih dahulu, yakni melarutkan K₂CO₃ dan Piperazine+DEA dengan aquades dengan kemurnian >99%. Konsentrasi larutan diukur dengan metode titrasi. Densitas larutan *amine* dan komponen-komponen murni ditentukan dengan menggunakan alat piknometer. Temperatur *bath* dikontrol dengan perbedaan ±0,05°C.

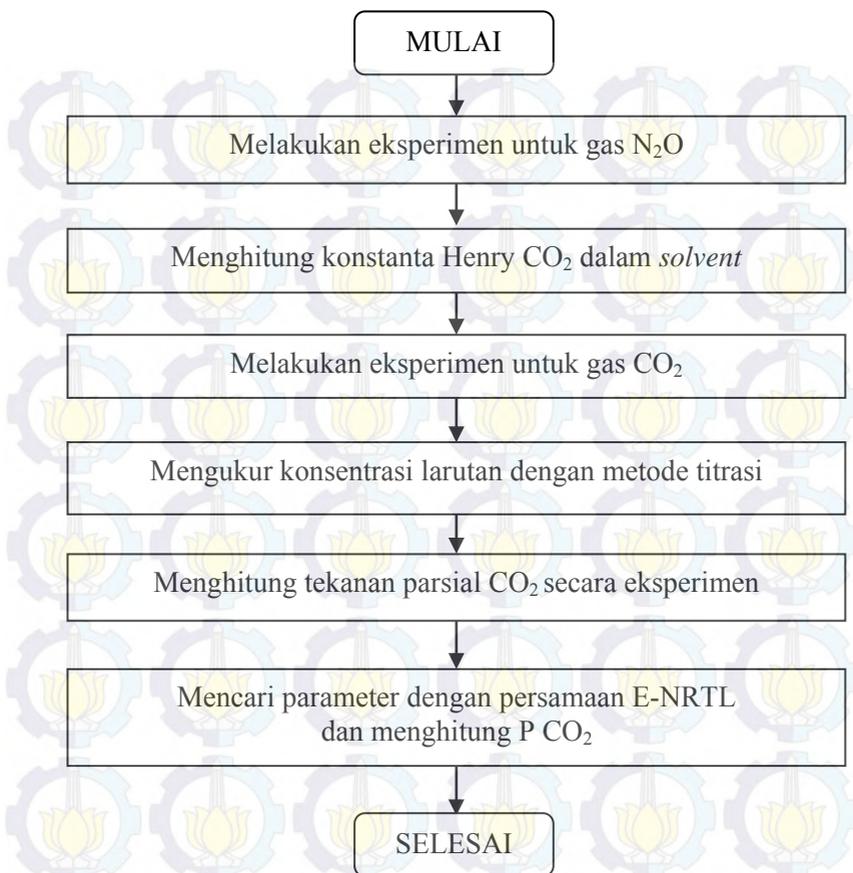
3.5.2 Prosedur Penelitian

1. Membuat sampel penelitian dengan campuran 30% K₂CO₃ dan 5% PZ-DEA
2. Mempersiapkan kondisi peralatan dengan cara mengalirkan gas CO₂ ke dalam rangkaian alat selama ±5 menit.
3. Menutup kedua keran sehingga gas CO₂ berada di dalam *Absorption Flask*

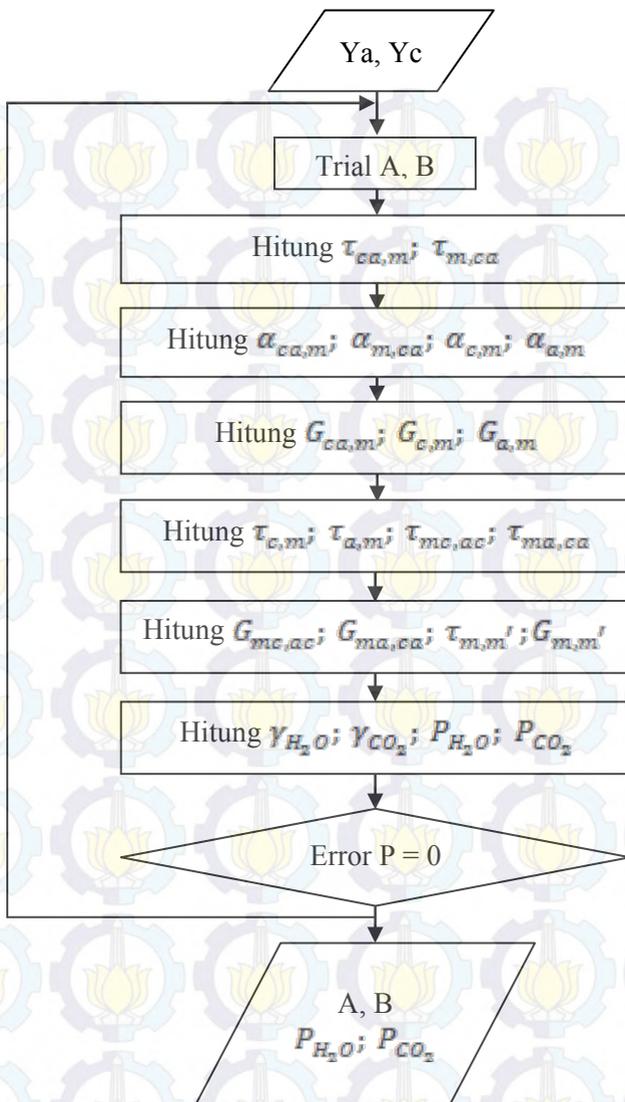
4. Mengkondisikan *Movable Manometric Leg* hingga level pada manometer air sama.
5. Melakukan injeksi larutan sebanyak 20 mL dengan *Syringe* kedalam *Absorption Flask* dan mencatat perubahan level pada manometer air.
6. Mengaduk sampel dengan *shaker* pada *waterbath*.
7. Mengukur volume gas setiap 4-5 menit sampai kesetimbangan tercapai. Kesetimbangan dikatakan tercapai ketika level pada manometer air tidak berubah.
8. Mengukur konsentrasi larutan dengan metode titrasi.
9. Melakukan langkah yang sama untuk nilai variabel penelitian yang lain.
10. Mengkorelasikan hasil penelitian dengan model E-NRTL.

3.5.2 Diagram Alir Metodologi Penelitian

Diagram alir percobaan ini ditampilkan dalam Gambar 3.2 dimana dari hasil eksperimen dengan gas CO_2 , dilakukan perhitungan tekanan parsial CO_2 secara eksperimen. Setelah itu, dilakukan *fitting* parameter untuk menentukan tekanan parsial CO_2 dengan menggunakan model E-NRTL, dimana untuk memperoleh parameter yang ditunjukkan pada Gambar 3.3.



Gambar 3.2 Diagram Alir Metodologi Penelitian



Gambar 3.3 Diagram Alir Perhitungan Parameter dengan Persamaan E-NRTL

3.6 Evaluasi Data

Berdasarkan data hasil percobaan dan data lain dari literatur maka dilakukan perhitungan-perhitungan sebagai berikut:

- Perhitungan konsentrasi kesetimbangan N_2O (C_{A^*})

$$V_{\text{gas terabsorb}} = V_{\text{sampel}} - \Delta V_{\text{gas}} \quad (3.1)$$

$$\text{mol total gas terabsorp} ((n) = \frac{PV}{RT} \quad (3.2)$$

$$C_{A^*} = \frac{\text{mol total gas terabsorp}}{\text{Volumeliquid}} \quad (3.3)$$

- Perhitungan konstanta Henry N_2O dalam larutan K_2CO_3

$$H_A = \frac{P_A}{C_A^*} \quad (3.4)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO_2 dalam larutan air

$$H_{CO_2, \text{water}} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (2.8249 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2044}{T}\right) \quad (3.5)$$

- Perhitungan konstanta Henry N_2O dalam larutan air

$$H_{N_2O, \text{water}} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (8.5470 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2284}{T}\right) \quad (3.6)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO_2 dalam larutan K_2CO_3

$$\frac{H_{CO_2, a \text{ min e}}}{H_{N_2O, a \text{ min e}}} = \frac{H_{CO_2, \text{water}}}{H_{N_2O, \text{waer}}} \quad (3.7)$$

- Menghitung parameter
Parameter nonrandom

$$\begin{aligned} \alpha_{mm'} &= \alpha_{m'm'}, \alpha_{m,cm} = \alpha_{cm,m}, \alpha_{ca,ca'} = \alpha_{ca'ca}, \alpha_{ca,c'a} \\ &= \alpha_{c'a,ca}, \alpha_{cm}, \alpha_{am}, \alpha_{mc,ac}, \alpha_{ma,ca} \end{aligned}$$

Parameter interaksi biner

$$\tau_{mm'}, \tau_{m'm'}, \tau_{m,ca}, \tau_{ca,m}, \tau_{ca,ca'}, \tau_{ca'ca}, \tau_{ca,c'a}, \tau_{c'a,ca}, \tau_{cm}, \tau_{am}, \tau_{mc,ac}, \tau_{ma,ca}$$

$$Y_a = \frac{X_a}{\sum_{a'} X_{a'}} \quad (3.8)$$

$$Y_c = \frac{X_c}{\sum_{c'} X_{c'}} \quad (3.9)$$

$$\tau = A + B \left(\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353.15(K)} \right) \quad (3.10)$$

Dengan nilai konstanta A dan B didapatkan dari hasil fitting parameter.

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm} \quad (3.11)$$

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am} \quad (3.12)$$

$$\alpha_{cm} = \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \quad (3.13)$$

$$\alpha_{am} = \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \quad (3.14)$$

$$G_{am} = \sum_c Y_c G_{ca,m} \quad (3.15)$$

$$G_{cm} = \sum_a Y_a G_{ca,m} \quad (3.16)$$

$$\tau_{cm} = - \frac{\ln(G_{cm})}{\alpha_{cm}} \quad (3.17)$$

$$\tau_{am} = -\frac{\ln(G_{am})}{\alpha_{am}} \quad (3.18)$$

$$\tau_{ma,ca} = \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (3.19)$$

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (3.20)$$

$$G_{mc,ac} = \exp(\alpha_{mc,ac} \tau_{mc,ac}) = \exp(\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \quad (3.21)$$

$$G_{ma,ca} = \exp(\alpha_{ma,ca} \tau_{ma,ca}) = \exp(\alpha_{am} \tau_{ma,ca}) \quad (3.22)$$

- Menghitung nilai estimasi koefisien aktifitas (γ) masing-masing komponen

$$\begin{aligned} \ln \gamma_m^{lc} = & \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} - \sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \left(\tau_{mm'} - \frac{\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \right) \\ & + \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \left(\tau_{mc,ac} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \right) \\ & + \sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \left(\tau_{ma,ca} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\frac{1}{z_c} \ln \gamma_c^{lc} = \sum_a Y_a \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} + \sum_m \frac{X_m G_{cm}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{cm} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c \sum_a \frac{Y_c X_a G_{ca,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \left(\tau_{ca,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{km,c'a} \tau_{km,c'a}}{\sum_k X_k G_{km,c'a}} \right) \quad (3.24)$$

$$\frac{1}{z_a} \ln \gamma_a^{lc} = \sum_c Y_{aca} \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} + \sum_m \frac{X_m G_{am}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{am} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{ac,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \left(\tau_{ac,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) \quad (3.25)$$

- Membuat kurva solubilitas pada berbagai suhu, perbandingan hasil eksperimen dengan data hasil estimasi.
- Membuat kurva pengaruh suhu terhadap CO₂ terabsorp pada berbagai konsentrasi umpan gas CO₂.
- Membuat kurva hubungan antara P_{CO₂} dengan CO₂ loading dengan membandingkan hasil eksperimen dengan hasil estimasi.

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui pengaruh penambahan campuran Piperazine-DEA terhadap solubilitas CO₂ dalam larutan 30% berat K₂CO₃ untuk berbagai variabel penambahan Piperazine-DEA dengan total 5% berat campuran menggunakan konsentrasi CO₂ umpan yang berbeda dari 5% hingga 20% dalam range suhu 30-50 °C.

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan fasa uap-cair CO₂ dalam larutan K₂CO₃ dengan promotor campuran Piperazine-DEA dalam berbagai konsentrasi *solvent*, konsentrasi CO₂ dan suhu pada tekanan atmosferik. Data penelitian yang didapatkan akan dikorelasikan dengan menggunakan metode E-NRTL sehingga bisa memprediksi kondisi di luar data penelitian.

4.1 Validasi Peralatan Penelitian

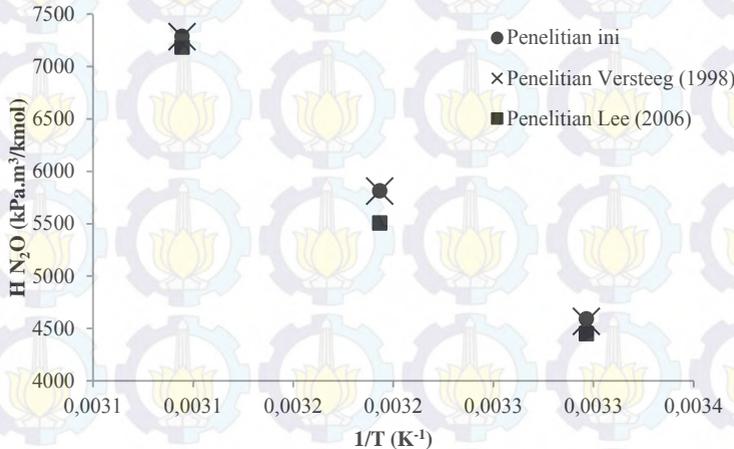
Validasi peralatan penelitian dilakukan menggunakan air sebagai pelarut. Validasi ini mengacu pada hasil eksperimen penelitian sebelumnya yaitu Versteeg (1988) dan Lee (2006) yang dilakukan pada suhu 30–50°C. Hasil uji validasi ditunjukkan pada Tabel 4.1 berikut:

Tabel 4.1 Hasil Validasi Peralatan Penelitian

H _{N2O} (kPa.m ³ /kmol) (Penelitian ini)	H _{N2O} (kPa.m ³ /kmol) (Versteeg, 1988)	H _{N2O} (kPa.m ³ /kmol) (Lee, 2006)
4352	4568	4450
5889	5811	5504
7261	7282	7184

Dari Tabel 4.1 tersebut terlihat bahwa harga konstanta Henry hasil validasi telah sesuai dengan harga yang diperoleh dari hasil eksperimen Versteeg (1988) dan Lee (2006). Hal ini

menunjukkan bahwa peralatan penelitian telah memadai untuk digunakan dalam melakukan penelitian pengaruh penambahan Piperazine dan DEA terhadap solubilitas karbondioksida dalam larutan potassium karbonat (K_2CO_3).



Gambar 4.1 Hasil Validasi Peralatan Eksperimen

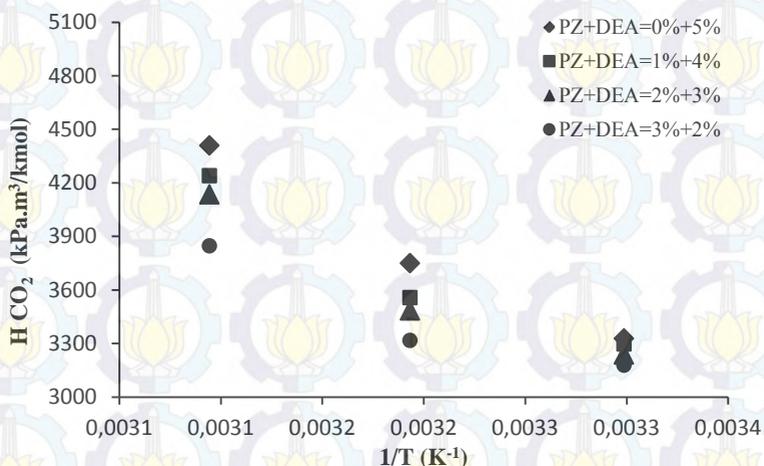
4.2 Hasil Eksperimen dan Pembahasan

a. Solubilitas CO_2 secara Fisik

Data solubilitas gas CO_2 dalam pelarut alkanolamine tidak dapat diukur secara langsung. Oleh karena itu, analogi gas N_2O dipakai untuk mengestimasi solubilitas gas CO_2 dalam pelarut alkanolamine. Dalam penelitian ini, dilakukan dengan variabel konsentrasi awal larutan K_2CO_3 30%, PZ-DEA 0-5%, 1-4%, 2-3%, dan 3-2% menggunakan konsentrasi CO_2 umpan yang berbeda 5%, 10%, dan 20% CO_2 dalam range suhu 30-50 °C. Data solubilitas fisik CO_2 dalam pelarut diperoleh dari persamaan analogi N_2O yang telah dikemukakan oleh Clarke (1964):

$$\frac{H_{CO_2,amine}}{H_{N_2O,amine}} = \frac{H_{CO_2,water}}{H_{N_2O,water}} \quad (4.1)$$

Untuk mendapatkan data solubilitas N_2O dan CO_2 dalam air, dapat digunakan persamaan (2.22) dan (2.23) berdasarkan studi yang dilakukan oleh Versteeg dan Swaaij (1988). Sedangkan untuk data solubilitas N_2O dalam pelarut didapatkan dari hasil penelitian ini, sehingga data-data yang dibutuhkan untuk menghitung data solubilitas CO_2 dalam pelarut dengan persamaan (4.1) telah terpenuhi. Data solubilitas N_2O yang dihasilkan dalam setiap pelarut $K_2CO_3+PZ+DEA-H_2O$ pada konsentrasi ini ditunjukkan pada Gambar 4.2 di bawah ini:



Gambar 4.2 Solubilitas CO_2 pada 30% K_2CO_3 dengan Promotor PZ-DEA

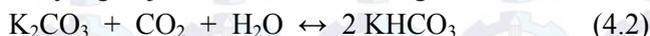
Dari Gambar 4.2 menunjukkan bahwa hubungan antara 1/suhu dan konstanta Henry berbanding terbalik, semakin tinggi harga 1/suhu maka nilai konstanta Henry semakin kecil. Hal ini berarti dengan peningkatan suhu menyebabkan peningkatan harga dari konstanta Henry dan semakin tinggi harga dari konstanta Henry menunjukkan bahwa gas semakin sulit terlarut dalam larutan. Sehingga dengan kata lain meningkatnya nilai 1/suhu menyebabkan kelarutan gas oleh liquid semakin besar dan itu

terjadi pada suhu yang lebih rendah, CO₂ lebih banyak terlarut di larutan. Dari grafik diatas menunjukkan bahwa pelarut 3-2% PZ-DEA memiliki nilai konstanta Henry terkecil jika dibandingkan dengan campuran lainnya. Hal ini menunjukkan bahwa daya solubilitas CO₂ secara fisik dengan pelarut 3-2% PZ-DEA lebih baik dan melarutkan gas lebih banyak jika dibandingkan dengan pelarut lainnya.

b. Solubilitas CO₂ secara Kimia

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan mengetahui pengaruh penambahan zat aditif atau promotor Piperazine-DEA terhadap solubilitas gas karbon dioksida (CO₂) dalam larutan kalium karbonat (K₂CO₃) pada tekanan atmosferik. Setelah terjadi kesetimbangan dilakukan pengambilan sampel larutan untuk pengukuran densitas larutan dan analisa larutan dengan titrasi. Titrasi dilakukan untuk mengetahui kadar CO₃²⁻ dan HCO₃⁻ dalam larutan. Analisa kadar HCO₃⁻ dalam larutan dilakukan untuk mengetahui jumlah gas CO₂ yang bereaksi dengan larutan K₂CO₃ karena CO₂ yang terabsorb ada yang bereaksi dan terlarut dengan larutan K₂CO₃. Pengukuran densitas dilakukan dengan cara yang sederhana dengan menggunakan piknometer.

Reaksi yang terjadi dalam kesetimbangan larutan:



Di dalam larutan, aditif PZ akan meningkatkan jumlah terbentuknya HCO₃⁻



Sehingga akan meningkatkan jumlah CO₂ yang bereaksi.



Hasil perhitungan besarnya CO₂ yang terabsorb dengan larutan dapat dilihat pada Tabel 4.2 :

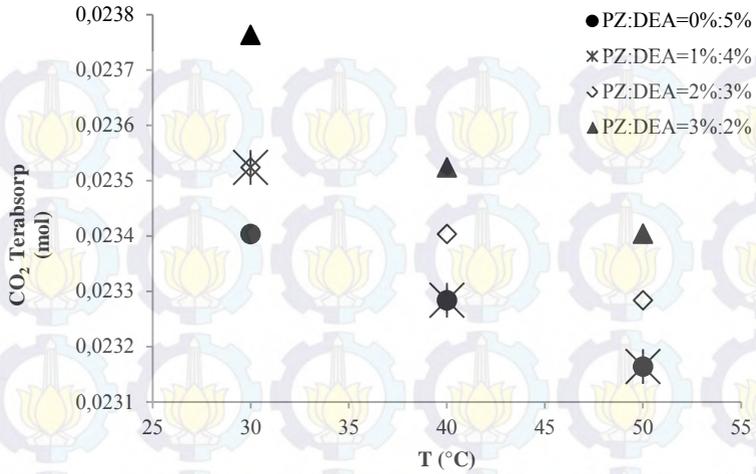
Tabel 4.2 Hasil Perhitungan CO₂ Terabsorp

PZ	DEA	Suhu (°C)	CO ₂ Terabsorp (mol)		
			Umpan 5% CO ₂	Umpan 10% CO ₂	Umpan 20% CO ₂
0	5	30	0,0234	0,0252	0,0294
		40	0,0233	0,0251	0,0292
		50	0,0232	0,0250	0,0290
1	4	30	0,0235	0,0253	0,0295
		40	0,0233	0,0251	0,0293
		50	0,0232	0,0250	0,0292
2	3	30	0,0235	0,0253	0,0295
		40	0,0234	0,0252	0,0294
		50	0,0233	0,0251	0,0293
3	2	30	0,0238	0,0254	0,0296
		40	0,0235	0,0253	0,0295
		50	0,0234	0,0252	0,0294

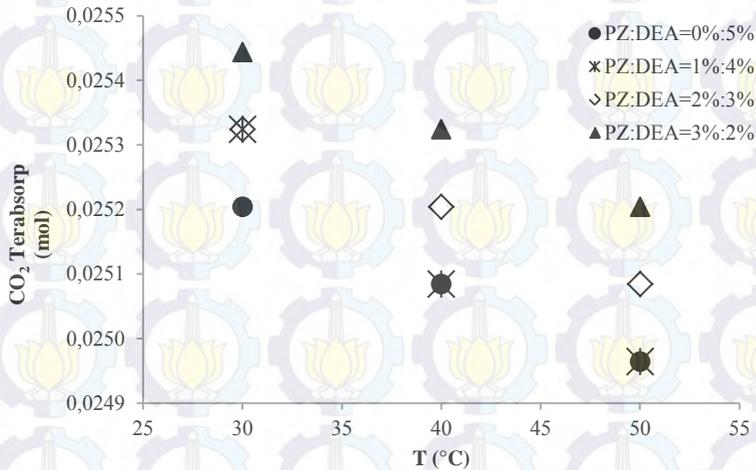
Dari Tabel 4.2, dapat dilihat hasil perhitungan dari jumlah mol CO₂ terabsorp, CO₂ terabsorp merupakan jumlah antara CO₂ bereaksi dan CO₂ terlarut. CO₂ terlarut disini merupakan CO₂ dalam larutan yang tidak bereaksi. Untuk perhitungan jumlah CO₂ terlarut dengan menggunakan rumus konstanta kesetimbangan dari Austgen and Rochelle (1991) yaitu:

$$\ln K_x = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 T + C_4 \ln T \quad (4.6)$$

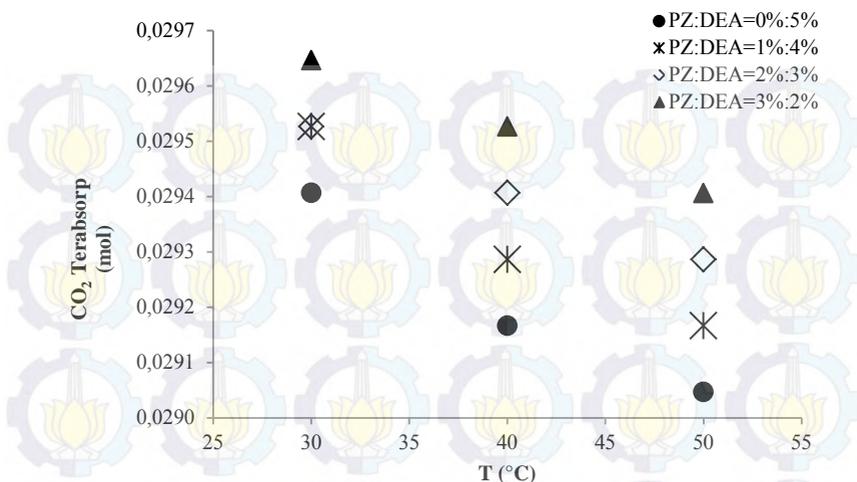
Hubungan CO₂ yang terabsorp dengan suhu dapat dilihat pada Gambar 4.3 - 4.5:



Gambar 4.3 Pengaruh Suhu terhadap CO₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 5% CO₂



Gambar 4.4 Pengaruh Suhu terhadap CO₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 10% CO₂



Gambar 4.5 Pengaruh Suhu terhadap CO₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 20% CO₂

Dari Gambar 4.3-4.5 terlihat bahwa, pada konsentrasi umpan CO₂ dan campuran promotor yang sama, dengan meningkatnya suhu dari 30-50°C maka jumlah mol CO₂ yang terabsorp mengalami penurunan. Hal ini disebabkan K₂CO₃ dengan promotor piperazine adalah larutan yang memiliki panas reaksi yang rendah dan bersifat *eksoterm*, sehingga kenaikan suhu akan menurunkan laju reaksi larutan benfield dengan gas CO₂. Kenaikan suhu berdampak pada penurunan kadar ion HCO₃⁻ dalam larutan.

Di samping itu, pada suhu dan campuran promotor yang sama, jumlah CO₂ terabsorp lebih banyak pada konsentrasi CO₂ umpan yang lebih tinggi. Pada umpan 5% CO₂, terabsorp sebanyak 0,23164-0,23763 mol. CO₂ terabsorp mengalami kenaikan pada umpan 10% CO₂, yaitu 0,24965-0,25444 mol. Pada umpan 20% CO₂, berkisar diantara 0,29047-0,029646 mol CO₂ yang dapat terabsorp, nilai pada umpan 20% CO₂ merupakan yang tertinggi apabila dibandingkan dengan konsentrasi CO₂ umpan yang lainnya.

Selain itu, dapat dilihat pula bahwa promotor 3-2% PZ-DEA memiliki nilai CO_2 terabsorpsi tertinggi pada tiap konsentrasi umpan. Hal ini disebabkan oleh PZ yang dapat bereaksi lebih cepat dengan CO_2 dibandingkan *amine* lainnya. PZ adalah diamine, sehingga dapat mengabsorpsi 2 mol CO_2 per mol *amine* berdasarkan Cullinane (2005). Dari hasil yang didapatkan, terdapat beberapa data yang memiliki nilai CO_2 terabsorpsi berhimpit. Hal ini terjadi dikarenakan adanya pembulatan pada nilai CO_2 terabsorpsi yang sebenarnya nilai tersebut tidak persis sama, dimana nilai tersebut merupakan penjumlahan dari CO_2 terlarut dan CO_2 bereaksi. Nilai CO_2 terabsorpsi yang hampir sama ini dikarenakan adanya penambahan konsentrasi PZ yang seiringan dengan pengurangan konsentrasi DEA atau sebaliknya pada tiap variabel. Hal yang serupa terjadi pada penelitian *Zulfetra dan Nuharani* (2014).

Dari harga CO_2 terabsorpsi dalam larutan akan dapat diperoleh nilai CO_2 loading. CO_2 loading merupakan rasio antara jumlah total mol CO_2 yang mampu diabsorpsi terhadap total mol K^+ dan mol *amine* yang terkandung dalam larutan.

4.3 Korelasi dengan Model E-NRTL

Untuk melakukan perhitungan korelasi tekanan kesetimbangan dengan menggunakan data fraksi mol komponen pada kondisi kesetimbangan dari eksperimen, dihitung dengan model E-NRTL. Model E-NRTL ini telah cukup baik untuk memprediksi kelakuan larutan elektrolit lemah hingga elektrolit kuat. Selain itu, berdasarkan Chen dan Song (2004) menyatakan bahwa model E-NRTL (*Electrolyte Non Random Two Liquid*) telah diaplikasikan secara luas untuk menunjukkan sifat-sifat termodinamika dari berbagai macam sistem elektrolit. Misalnya, model ini dapat digunakan untuk menghitung koefisien aktivitas komponen-komponen larutan elektrolit. Untuk mendapatkan parameter biner yang digunakan dalam perhitungan koefisien aktivitas CO_2 dengan model E-NRTL, maka dilakukan *fitting Average Absolute Relative Deviation (AARD)* antara (P_{CO_2}) yang

didapatkan dari eksperimen dengan (P_{CO_2}) hasil perhitungan korelasi menggunakan *solver tool* pada *Microsoft Excel* dengan metode GRG (Generalized Reduced Gradient) Non Linear.

Dari metode *fitting* yang telah dilakukan, kemudian digunakan untuk menghitung tekanan parsial CO₂ hasil korelasi (P_{CO_2}) dapat ditabelkan hasilnya dalam Tabel 4.3 sampai 4.6 yang merupakan perbandingan antara P_{CO_2} hasil eksperimen dan hasil korelasi untuk metode *fitting* dapat dilihat pada berikut:

Tabel 4.3 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk 0-5% PZ-DEA

Konsentrasi Gas CO ₂ Umpan	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	579,40	539,64	6,86%
	40	668,33	671,16	0,42%
	50	827,07	827,12	0,01%
10%	30	721,74	718,14	0,50%
	40	830,49	856,87	3,18%
	50	1016,75	993,49	2,29%
20%	30	1060,96	1060,96	0,00%
	40	1208,06	1259,55	4,26%
	50	1477,89	1462,30	1,05%

Tabel 4.4 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk 1-4% PZ-DEA

Konsentrasi Gas CO ₂ Umpan	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	567,24	546,25	3,70%
	40	623,61	590,09	5,38%
	50	787,64	788,29	0,08%
10%	30	704,85	703,48	0,19%
	40	774,04	773,42	0,08%
	50	961,19	975,25	1,46%
20%	30	1032,64	1029,05	0,35%
	40	1133,73	1130,04	0,33%
	50	1406,95	1382,82	1,72%

Tabel 4.5 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk 2-3% PZ-DEA

Konsentrasi Gas CO ₂ Umpan	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	538,26	549,84	2,15%
	40	618,04	591,92	4,23%
	50	772,34	762,77	1,24%
10%	30	667,27	685,84	2,78%
	40	768,16	773,67	0,72%
	50	919,98	928,96	0,98%
20%	30	974,94	997,00	2,26%
	40	1122,15	1149,22	2,41%
	50	1342,21	1342,22	0,00%

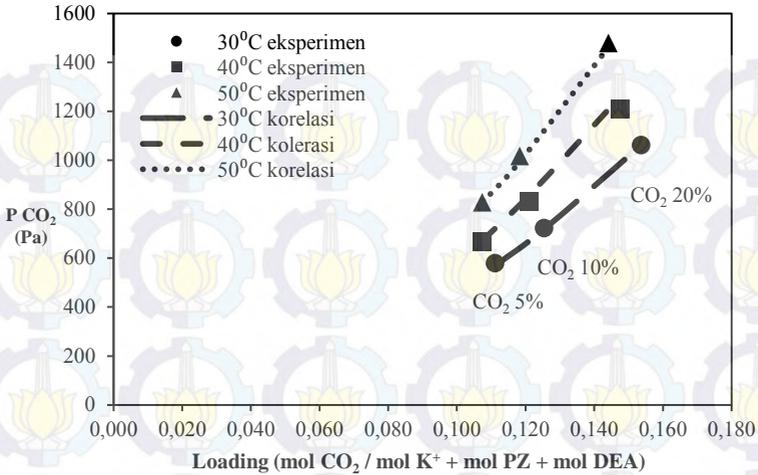
Tabel 4.6 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk 3-2% PZ
DEA

Konsentrasi Gas CO ₂ Umpan	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	517,51	517,34	0,03%
	40	557,54	557,83	0,05%
	50	700,08	687,11	1,85%
10%	30	637,07	634,49	0,41%
	40	688,10	688,46	0,05%
	50	822,08	804,07	2,19%
20%	30	927,01	927,00	0,00%
	40	1000,26	1000,36	0,01%
	50	1193,54	1149,97	3,65%

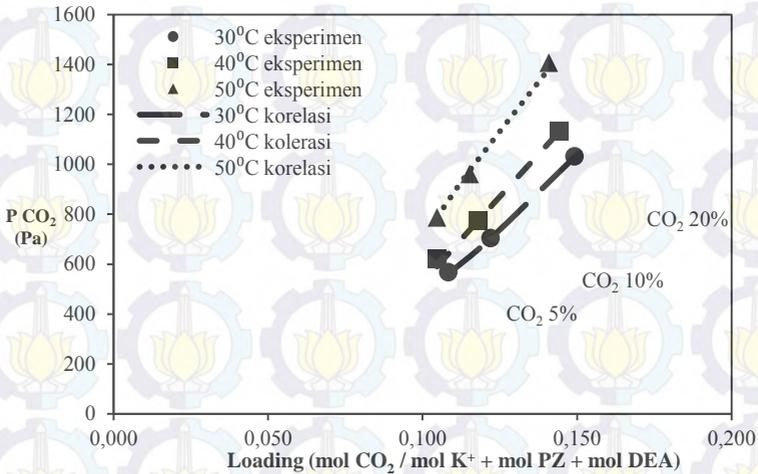
Dari Tabel 4.3 sampai 4.6 dapat terlihat bahwa, pada konsentrasi CO₂ umpan dan promotor yang sama, suhu berbanding lurus dengan tekanan parsial CO₂. Meningkatnya suhu akan menaikkan tekanan parsial CO₂ didalam larutan. Dapat dilihat juga bahwa pada hasil korelasi untuk setiap tekanan parsial gas CO₂ meningkat seiring dengan kenaikan suhu.

Selain itu, dari Tabel 4.3 sampai 4.6 dapat dilihat juga pada suhu dan campuran promotor yang sama, tekanan parsial CO₂ semakin tinggi pada konsentrasi gas umpan CO₂ yang lebih tinggi.

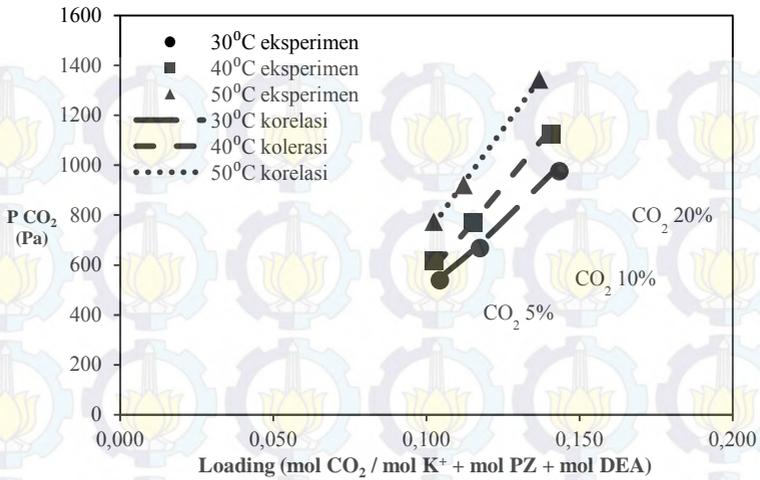
Untuk hubungan antara tekanan parsial CO₂ (P_{CO_2}) baik eksperimen maupun korelasi dari setiap campuran larutan terhadap CO₂ loading seperti yang ditunjukkan pada Gambar 4.6 - 4.9:



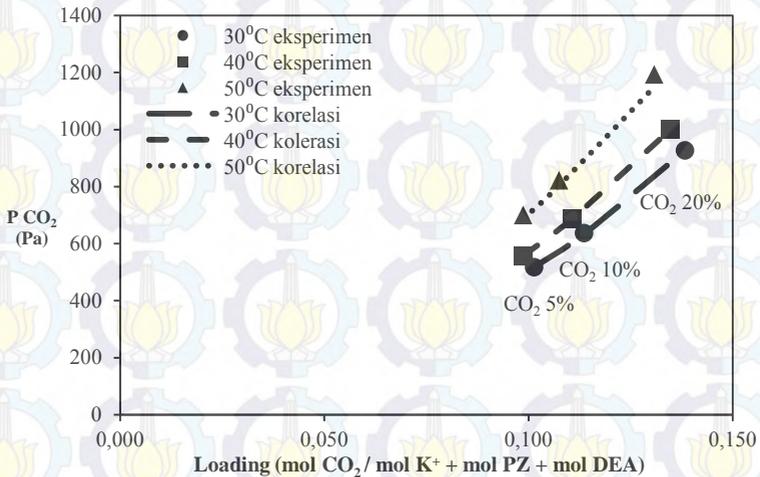
Gambar 4.6 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading Promotor 0-5% PZ-DEA



Gambar 4.7 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading Promotor 1-4% PZ-DEA



Gambar 4.8 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading Promotor 2-3% PZ-DEA



Gambar 4.9 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading Promotor 3-2% PZ-DEA

Dari Gambar 4.6 sampai 4.9 dapat dilihat untuk hasil eksperimen maupun hasil korelasi menunjukkan bahwa, pada konsentrasi CO₂ umpan dan promotor yang sama, semakin besar gas CO₂ *loading* maka tekanan parsial juga semakin besar. Hal ini disebabkan karena terjadinya kenaikan konsentrasi CO₂ didalam larutan yang pada dasarnya selalu berkesetimbangan dengan konsentrasi CO₂ didalam fase gas (Kurniati, Y. dan Panca S.U, 2013). Pada konsentrasi CO₂ umpan dan promotor yang sama pula, suhu berbanding lurus dengan tekanan parsial CO₂. Meningkatnya suhu akan menaikkan tekanan parsial CO₂ didalam larutan. Dapat dilihat juga bahwa pada hasil korelasi untuk setiap tekanan parsial gas CO₂ meningkat seiring dengan kenaikan suhu. Dari Gambar 4.6 sampai 4.9 juga dapat dilihat bahwa, pada suhu dan campuran promotor yang sama, jumlah CO₂ *loading* lebih banyak pada konsentrasi CO₂ umpan yang lebih tinggi.

Penelitian ini dapat dibandingkan dengan penelitian Harimurti (2011) yang menggunakan 30% K₂CO₃ tanpa promotor pada suhu dan konsentrasi CO₂ umpan yang sama. Dalam penelitian Harimurti (2011) didapatkan CO₂ *loading* sebesar 0,027 (mol CO₂ / mol K⁺). Apabila dibandingkan dengan penelitian ini pada suhu dan konsentrasi CO₂ umpan yang sama, nilai yang CO₂ *loading* didapatkan bernilai 0,1386 hingga 0,1536 (mol CO₂ / mol K⁺ + mol PZ + mol DEA). Sehingga dapat disimpulkan bahwa penambahan promotor PZ-DEA dapat menaikkan CO₂ *loading* secara signifikan sebesar 413-468% dari nilai sebelumnya.

Hilliard (2008) melakukan penelitian menggunakan sistem CO₂-K₂CO₃-PZ-H₂O dengan suhu dan konsentrasi promotor PZ yang berbeda dengan penelitian ini, namun tren yang dihasilkan sama. Pada penelitian Hilliard (2008) menghasilkan nilai *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* sebesar 15,48%, sedangkan pada penelitian ini model E-NRTL memberikan hasil yang lebih baik pada sistem CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O dengan *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* 3,38% untuk *fitting* pada tiap variasi komposisi gas umpan.

DAFTAR PUSTAKA

Al-Rashed, O. A., S. H. Ali. Modeling the solubility of CO₂ and H₂S in DEA–MDEA alkanolamine solutions using the electrolyte–UNIQUAC model. *Sep Purif Technol.* **2012**, *94*, 71–8.

Altway, S. dan K. D. Marhetha. Prediksi Solubilitas Gas CO₂ di Dalam Larutan Potasium Karbonat dan MDEA Menggunakan Model Elektrolit UNIQUAC. *Skripsi Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember.* **2010**.

Altway. S, Kuswandi, dan A.Altway. Prediction of Gas-Liquid Equilibria of CO₂-K₂CO₃-MDEA-H₂O System by Electrolyte UNIQUAC Model. *IPTEK Journal of Engineering.* **2014**, *1*, 1.

Arora, J. S. Introduction to Optimum Design 3rd edition. Academic Press. USA. **2012**. 567-569.

Austgen, D.M., G.T. Rochelle, X. Peng, dan C.C. Chen. Model of Vapor-Liquid Equilibria for Aqueous Acid Gas-Alkanolamine Systems Using the Electrolyte-NRTL Equation. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1989**, *28*, 1060-1073.

Austgen, D.M., G.T. Rochelle, X. Peng, dan C.C. Chen. Model of Vapor-Liquid Equilibria for Aqueous Acid Gas-Alkanolamine Systems. 2. Representation of H₂S and CO₂ Solubility in Aqueous MDEA and CO₂ Solubility in Aqueous Mixtures of MDEA with MEA or DEA. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1991**, *30*, 543-555.

- Chen, C.C., Song, Y. Solubility Modeling with Nonrandom Two-Liquid Segment Activity Coefficient Model. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2004**, *43*, 8354.
- Clarke, J. K. A. Kinetics of Absorption of Carbon Dioxide In Monoethanolamine Solutions tt Short Contact Times. *Ind. Eng. Chem. Fundamental.* **1964**, *3*.
- Cullinane, J. Tim, G.T. Rochelle. Carbon dioxide Absorption with Aqueous Potassium Carbonate Promoted by Piperazine. *Chem Eng Sci.* **2004**, *59*, 3619-3630
- Dudley, Bob. BP Statistical Review of World Energy June 2014. BP. London. **2014**
- Dang, H. dan G.T. Rochelle. CO₂ Absorption Rate and Solubility in Monoethanolamine / Piperazine / Water. *Journal, Department of Chemical Engineering, University of Texas at Austin.* **2001**.
- Haimour, N., O.C. Sandall. Absorption of Carbon Dioxide Into Aqueous Methyl-diethanolamine. *Chem. Eng. Science.* **1984**, *39*.
- Hilliard, M.D. A Predictive Thermodynamic Model or an Aqueous Blend of Pottasium Carbonate, Piperazine, and Monoethanolamine for Carbon Dioxide Capture from Flue Gas. *Dissertation, Department of Chemical Engineering, The University of Texas at Austin.* **2008**.
- Kuswandi, K. Anam, dan Y.P. Laksana. Solubilitas Gas CO₂ dalam Larutan Potassium Karbonat. *Jurnal Teknik Kimia, Universitas Pembangunan Nasional.* **2008**.
- Kurniati, Y., A.Altway, Kuswandi. Eksperimental Penentuan Keseimbangan Uap-Cair dalam Sistem Larutan Elektrolit

CO₂-K₂CO₃-MDEA+DEA-H₂O. *Prosiding Seminar Nasional Teknik Kimia "Kejuangan"*. **2014**.

Lee, Seungmoon; Song, Ho-Jun; Maken, Sanjeev; Park, Jong-Jin; Park, Won-Jin. Physical Solubilities and Diffusivity of N₂O and CO₂ in Aqueous Solutions of Sodium Glycinate. *J Chem Eng Data*. **2006**, *51*, 504-509.

Liu, Y., L. Zhang, S. Watanasiri. Representing Vapor-Liquid Equilibrium for an Aqueous MEA-CO₂. *Ind. Eng. Chem.* **1999**, *38*.

Ma, Xiaoguang. Inna Kim. Ralf Beck. Hanna Knuutila dan Jens Petter Andreassen. Precipitation of Piperazine in The Piperazine-H₂O-CO₂ System. *Journal, Department of Chemical Engineering, NTNU, Norway*. **2010**.

Renon, H. Prausnitz, J.M. Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures. *AIChE J.* **1968**, *14*, 135-144

Suprpto, Y. The World of Energy Volume I. PT Badak NGL. Samarinda. **2007**

Suprpto, Y. The World of Energy Volume IV. PT Badak NGL. Samarinda. **2007**

Thee, H., Y. A. Suryaputradinata, K. A. Mumford, K. H. Smith, G.D. Silva, S.E. Kentish, G. W. Stevens. A kinetic and process modeling study of CO₂ capture with MEA-promoted potassium carbonate solutions. *Chem Eng J.* **2012**, *210*, 271-279.

Versteeg, G. F., van Swaaij, W. P. M., Solubility and Diffusivity of Acid Gases (CO_2 , N_2O) in Aqueous Alkanolamine Solutions. *J Chem Eng Data*. **1988**, 33, 29-34.

Winarno, H., G. Wibawa, dan Kuswandi. Eksperimental dan Estimasi Kesetimbangan Fase Uap-Cair Sistem Larutan Elektrolit CO_2 - K_2CO_3 -Diethanolamine- H_2O . *Jurnal Teknik Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember*. **2008**.

Zhang Y., H. Que, C.C. Chen. Thermodynamic modeling for CO_2 absorption in aqueous MEA solution with electrolyte NRTL model. *Fluid Phase Equilib*. **2011**, 311, 67-75.

Zulfetra, I. dan F. Nuharani. Eksperimen dan Estimasi Kesetimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Larutan Elektrolit CO_2 - K_2CO_3 -(MDEA+DEA) dan CO_2 - K_2CO_3 -(Piperazine+DEA). *Skripsi Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember*. **2014**.

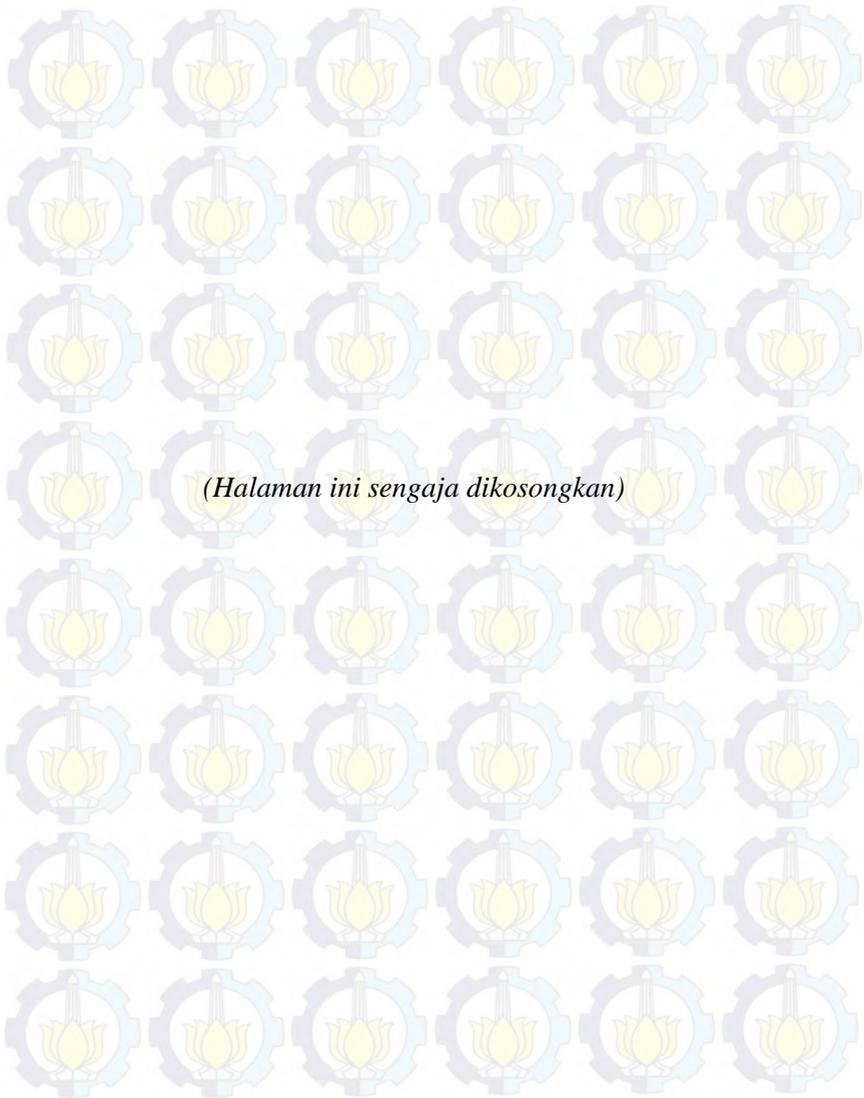
(<http://www.owlnet.rice.edu/~ceng403/co2abs.html>), tanggal akses 21 Maret 2015

BAB V

KESIMPULAN

5.1 Kesimpulan

Dari hasil eksperimen diperoleh harga konstanta Henry untuk absorpsi gas CO_2 dalam larutan K_2CO_3 30% dengan promotor campuran PZ-DEA sebesar 3179,23-4410,41 $\text{kPa}\cdot\text{m}^3/\text{kmol}$ dengan cara analogi gas N_2O . Nilai konstanta Henry yang diperoleh meningkat seiring dengan kenaikan suhu pada range 30-50°C. Pada konsentrasi CO_2 umpan dan promotor yang sama, kenaikan suhu operasi dapat menaikkan tekanan parsial gas CO_2 dalam larutan K_2CO_3 30% dengan promotor PZ-DEA yakni sebesar 517,34-1462,30 Pa. Meningkatnya konsentrasi CO_2 dalam gas umpan dapat meningkatkan besarnya CO_2 loading rata-rata sebesar 11,81% untuk 10% CO_2 umpan dan 36,43% untuk 20% CO_2 umpan. Penggunaan model E-NRTL memberikan hasil dengan *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* sebesar 3,38%.



APENDIKS

A.1 Perhitungan Eksperimen

Eksperimen ini dilakukan dengan variabel sebagai berikut:

1. Untuk Sistem K_2CO_3 -(PZ+DEA) :
Suhu (T) = 30 °C, 40 °C, dan 50°C
Kadar K_2CO_3 = 30% massa
Kadar PZ+DEA = 5% massa

Berikut contoh perhitungan dan penabelan hasil perhitungan:

- a. Sebagai contoh perhitungan, diambil suhu 40 °C dengan variabel larutan 30% massa K_2CO_3 dan 1% massa PZ dan 4% massa DEA. Contoh perhitungan sebagai berikut:

Perhitungan massa tiap komponen:

Basis:

Massa larutan ($m_{\text{larutan awal}}$) = 150 g larutan

Dengan komposisi larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\% \text{ massa } K_2CO_3 &= 30\% \\ \% \text{ massa PZ} &= 1\% \\ \% \text{ massa DEA} &= 4\% \\ \% \text{ massa } H_2O &= 100\% - (\% \text{ massa } K_2CO_3 + \% \text{ massa} \\ &\text{PZ} + \% \text{ massa DEA}) \\ &= 100\% - (30\% + 1\% + 4\%) \\ &= 100\% - 35\% = 65\%\end{aligned}$$

Massa tiap-tiap larutan dapat dihitung dengan rumus berikut:

Massa = % massa x $m_{\text{larutan awal}}$

Contoh perhitungan massa K_2CO_3 sebagai berikut:

$$m_{K_2CO_3} = \% \text{ massa } K_2CO_3 \times m_{\text{larutan awal}}$$

$$= 30\% \times 150 \text{ g}$$

$$= 45 \text{ g}$$

Perhitungan massa PZ, massa DEA dan massa H₂O dapat dilihat pada Tabel A.1 berikut:

Tabel A.1 Perhitungan Massa Tiap Komponen

Untuk 1% Massa PZ dan 4% Massa DEA

Senyawa	Komposisi (% Massa)	Massa (gram)	n (mol)	Fraksi mol
K ₂ CO ₃	30	45	0,324	0,05571
PZ	1	1,5	0,018	0,00309
DEA	4	6	0,057	0,00981
H ₂ O	65	97,5	5,417	0,93139
Total	100	150	5,816	1

Menghitung adanya N₂O terabsorb

Untuk menghitung mol N₂O terabsorb, dapat digunakan rumus sebagai berikut:

$$P = 1,01325 \times 10^5 \text{ Pa}$$

$$T = 40 \text{ }^\circ\text{C} = 313,15 \text{ K}$$

$$\text{Volume sampel} : 20 \text{ mL} = 2 \times 10^{-5} \text{ m}^3$$

$$\Delta V \text{ gas} = 10,3 \text{ mL} = 10,3 \times 10^{-6} \text{ m}^3$$

$$\begin{aligned} \text{Volume gas yang terabsorb} &= \text{Volume sampel} - \Delta V \text{ gas} \\ &= 2 \times 10^{-5} - 12 \times 10^{-6} \\ &= 0,0000097 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

Perhitungan konsentrasi kesetimbangan N₂O (C_A^{*})

$$\begin{aligned} \text{mol total gas terabsorp} (n) &= \frac{PV}{RT} \\ &= \frac{1,01325 \times 10^5 \cdot 0,0000097}{8,314 \times 313,15} \\ &= 0,0003775 \text{ mol} \end{aligned}$$

Hasil Perhitungan untuk mol N₂O terabsorb ditunjukkan pada Tabel A.2. dan %DEA pada Tabel A.2.

Tabel A.2 Perhitungan Mol N₂O Terabsorb %PZ dan %DEA

%PZ	%DEA	Suhu (°C)	N ₂ O Terabsorb (mol)
0	5	30	0,0004261
		40	0,0003580
		50	0,0002829
1	4	30	0,0004382
		40	0,0003775
		50	0,0002942
2	3	30	0,0004382
		40	0,0003853
		50	0,0003017
3	2	30	0,0004462
		40	0,0004048
		50	0,0003243

Menghitung Konstanta Henry N₂O Dalam Solvent

- Mol total yang terabsorb (n) = 3,775.10⁻⁷ kmol

$$C_{A^*} = \frac{\text{mol total gas terlarut}}{\text{Volume liquid}}$$

$$= \frac{3,775 \cdot 10^{-7}}{20}$$

$$= 0,019 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

- Perhitungan konstanta Henry N₂O dalam larutan K₂CO₃+PZ+DEA

$$P^v_{H_2O} / \text{bar} = 1.33567 \times 10^6 \exp(-5243/T(K))$$

$$= 7.24547 \text{ kPa}$$

$$\begin{aligned}
 P_{N_2O} &= P_{total} - x_{H_2O} \cdot P^v_{H_2O} - x_{K_2CO_3} \cdot P_{K_2CO_3} - x_{solvent} \cdot P_{amine} \\
 &= 1,01325 \times 10^5 - (0,93139)(7.24547) - 0 - 0 \\
 &= 94,5758 \text{ kPa}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_A &= \frac{P_A}{C_A^*} \\
 &= \frac{94,5758}{0,019} \\
 &= 5010,5359 \frac{\text{kPa} \cdot \text{m}^3}{\text{kmol}}
 \end{aligned}$$

Menghitung Konstanta Henry CO₂ Dalam Solvent (analogi N₂O)

- Perhitungan konstanta Henry CO₂ dalam air

$$H_{CO_2,water} (\text{kPa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1}) = (2.8249 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2044}{T}\right)$$

- Perhitungan konstanta Henry N₂O dalam air

$$H_{N_2O,water} (\text{kPa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1}) = (8.5470 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2284}{T}\right)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO₂ dalam larutan K₂CO₃+PZ+DEA dengan menggunakan rumus analogi N₂O

$$\frac{H_{CO_2,amine}}{H_{N_2O,amine}} = \frac{H_{CO_2,water}}{H_{N_2O,water}}$$

Hasil Perhitungan untuk Konstanta Henry (H) tercantum pada Tabel A.3

Tabel A.3 Perhitungan Mol H_{N_2O} dan H_{CO_2} Untuk %PZ dan %DEA

%PZ	%DEA	Suhu (°C)	H_{N_2O} (kPa.m ³ /kmol)	H_{CO_2} (kPa.m ³ /kmol)
0	5	30	4573,0194	3328,9821
		40	5282,6447	3749,5594
		50	6362,8356	4410,4154
1	4	30	4530,3781	3297,9409
		40	5010,5359	3556,4198
		50	6118,5258	4241,0714
2	3	30	4447,3473	3237,4976
		40	4909,5013	3484,7066
		50	5965,9664	4135,3245
3	2	30	4367,3084	3179,2324
		40	4673,6467	3317,2997
		50	5550,1114	3847,0736

- b. Berikut perhitungan menggunakan gas CO_2 Sebagai contoh perhitungan, diambil variabel gas 5% mol CO_2 dengan variabel larutan 30% massa K_2CO_3 dan 1% massa PZ dan 4% massa DEA. Contoh perhitungan sebagai berikut:

Perhitungan volume larutan awal:

Untuk menghitung volume larutan, sebelumnya harus diketahui terlebih dahulu massa dan densitas larutan dan didapatkan data sebagai berikut :

massa piknometer kosong = 13,378 g
 massa piknometer + aquades = 23,4248 g
 massa aquades = (13,5279 - 13,1756) g
 = 10,0467 g
 dengan massa jenis aquades = 1 g/mL

$$\begin{aligned}
 \text{volume piknometer} &= (10,0467 \text{ g}) / (1 \text{ g/mL}) \\
 &= 10,0467 \text{ mL} \\
 \text{massa piknometer + larutan} &= 26,1747 \text{ g} \\
 \text{massa larutan} &= (26,1747 - 13,378) \text{ g} \\
 &= 12,7969 \text{ g} \\
 \text{densitas larutan awal} &= (12,7969 \text{ g}) / (10,0467) \\
 &= 1,2737 \text{ g/mL} \\
 \text{volume larutan awal} &= (150 \text{ g}) / (1,2737 \text{ g/mL})
 \end{aligned}$$

$$= 117,7663 \text{ mL}$$

Untuk analisa komposisi karbonat dan bikarbonat mula-mula, diambil 10 ml larutan.

Analisa Awal Larutan:

- a. Menganalisa Adanya Bikarbonat (HCO_3^-) Mula-Mula
 Untuk menganalisa adanya bikarbonat (HCO_3^-) mula-mula, dilakukan titrasi dengan menggunakan titran HCl.

Titrasi 1

$$\text{Volume sampel larutan} = 5 \text{ mL}$$

$$\text{Molaritas HCl } (M_{\text{HCl}}) = 3 \text{ M}$$

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

$$\text{Volume HCl } (V_{\text{HCl}}) = 5 \text{ mL}$$

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) mula-mula dalam 10 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
 \text{Mol } \text{CO}_3^{2-} \text{ mula-mula} &= M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}} \\
 &= 3 \text{ M} \times 5 \text{ mL} \\
 &= 15 \text{ mmol}
 \end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) mula-mula dalam 20 mL larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \text{mol CO}_3^{2-} \text{ mula - mula} &= \frac{15 \text{ mmol} \times 20 \text{ mL}}{5 \text{ mL}} \\ &= 60 \text{ mmol} \\ &= 0,060 \text{ mol} \end{aligned}$$

Titrasi 2:

$$\text{Volume sampel larutan} = 5 \text{ mL}$$

$$\text{Molaritas HCl (M}_{\text{HCl}}) = 3,015 \text{ M}$$

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

$$\text{Volume HCl (V}_{\text{HCl}}) = 9 \text{ mL}$$

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) mula-mula dalam 10 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \text{Mol HCO}_3^- \text{ mula-mula} &= (\text{M}_{\text{HCl}} \times \text{V}_{\text{HCl}}) - \text{Mol CO}_3^{2-} \text{ mula-mula} \\ &= (3 \text{ M} \times 9 \text{ mL}) - 60 \text{ mmol} \\ &= 12 \text{ mmol} \end{aligned}$$

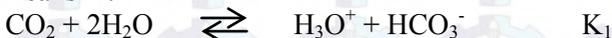
Sehingga dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) dalam 20 ml larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \text{mol HCO}_3^- \text{ mula - mula} &= \frac{12 \text{ mmol} \times 20 \text{ mL}}{5 \text{ mL}} \\ &= 48 \text{ mmol} \\ &= 0,048 \text{ mol} \end{aligned}$$

b. Menghitung Adanya CO_2 Terlarut Mula-Mula

Untuk menghitung mol CO_2 terlarut mula-mula, dapat digunakan rumus konstanta kesetimbangan dari reaksi-reaksi berikut:

Reaksi 1:



Reaksi 2:



Konstanta kesetimbangan masing-masing reaksi dapat dihitung dengan menggunakan persamaan berikut:

$$\ln K_x = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 T + C_4 \ln T$$

(Austgen dan Rochelle tahun 1991)

Konstanta C pada persamaan tersebut juga diperoleh dari Jurnal Austgen dan Rocelle tahun 1991, seperti pada Tabel A.4 berikut:

Tabel A.4 Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan

Keterangan	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄
Reaksi 1	231,465	-12.092,1	-36,7816	0
Reaksi 2	216,049	-12.431,7	-35,4819	0

Sehingga dapat dilakukan perhitungan konstanta kesetimbangan pada masing-masing reaksi kesetimbangan tersebut sebagai berikut :

$$\begin{aligned} \text{Dengan T sistem} &= 40 \text{ }^\circ\text{C} \\ &= (40 \text{ }^\circ\text{C} + 273.15) \text{ K} \\ &= 313,15 \text{ K} \end{aligned}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 1:

$$\begin{aligned} \ln K_1 &= 231,465 + \frac{-12.092,1}{313,15} + (-36,7816 \ln 313,15) + (0 \times 313,15) \\ &= -18,52 \\ K_1 &= 9,04 \cdot 10^{-9} \end{aligned}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 2:

$$\begin{aligned} \ln K_2 &= 216,049 + \frac{-12.431,7}{305,15} + (-35,4819 \ln 305,15) + (0 \times 305,15) \\ &= -27,55 \\ K_2 &= 1,081 \cdot 10^{-12} \end{aligned}$$

Hasil perhitungan konstanta kesetimbangan untuk kedua reaksi tersebut dapat dilihat pada Tabel A.5 berikut:

Tabel A.5 Hasil Perhitungan Konstanta Kestimbangan Pada Analisa Awal Untuk 5% Mol CO₂ pada suhu 40°C

Keterangan	K _x
Reaksi 1	9,04 . 10 ⁻⁹
Reaksi 2	1,081 . 10 ⁻¹²

Perhitungan CO₂ terlarut dapat dihitung dengan persamaan berikut:

$$[CO_2 \text{ terlarut}] = \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]}$$

dengan:

$$\begin{aligned} [HCO_3^-] &= \frac{\text{mol } HCO_3^-}{V_{\text{larutan}}} \\ &= \frac{0,048 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\ &= 2,4 \text{ mol/ml} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [CO_3^{2-}] &= \frac{\text{mol } CO_3^{2-}}{V_{\text{larutan}}} \\ &= \frac{0,06 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\ &= 0,003 \end{aligned}$$

maka:

$$\begin{aligned} [CO_2 \text{ terlarut}] &= \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]} \\ &= \frac{1,081 \cdot 10^{-12} \times 0,00241^2}{9,04 \cdot 10^{-9} \times 0,0030} \\ &= 0,000 \text{ mol/ml} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} CO_2 \text{ terlarut mula-mula} &= [CO_2 \text{ terlarut}] \times V_{\text{larutan}} \\ &= 0 \text{ mol/mL} \times 20 \text{ mL} \\ &= 0 \text{ mol} \end{aligned}$$

Analisa Akhir Larutan:

a. Menganalisa Jumlah Bikarbonat (HCO_3^-) Akhir

Untuk menganalisa jumlah bikarbonat (HCO_3^-) akhir, dilakukan titrasi dengan menggunakan titran HCl.

Titrasi 1:

Volume sampel larutan = 5 mL

Molaritas HCl (M_{HCl}) = 3 M

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

Volume HCl (V_{HCl}) = 6,16 mL

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) akhir dalam 5 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{Mol CO}_3^{2-} \text{ akhir} &= M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}} \\ &= 3 \text{ M} \times 6,16 \text{ mL} \\ &= 18,48 \text{ mmol}\end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) akhir dalam 20 ml larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{mol CO}_3^{2-} \text{ akhir} &= \frac{18,48 \text{ mmol} \times 20 \text{ ml}}{5 \text{ ml}} \\ &= 73,92 \text{ mmol} \\ &= 0,07392 \text{ mol}\end{aligned}$$

Titrasi 2:

Volume sampel larutan = 5 mL

Molaritas HCl (M_{HCl}) = 3 M

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

Volume HCl (V_{HCl}) = 10,04 mL

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) akhir dalam 5 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{Mol HCO}_3^- \text{ akhir} &= (M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}}) - \text{Mol CO}_3^{2-} \text{ akhir} \\ &= (3 \text{ M} \times 10,04 \text{ ml}) - 15,075 \text{ mmol} \\ &= 11,64 \text{ mmol}\end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) dalam 20 ml larutan sebagai berikut :

$$\text{mol HCO}_3^- \text{ akhir} = \frac{11,64 \text{ mmol} \times 20 \text{ ml}}{5 \text{ ml}} = 46,56 \text{ mmol} = 0,04656 \text{ mol}$$

b. Menghitung adanya CO_2 terlarut akhir

Untuk menghitung mol CO_2 terlarut akhir, dapat digunakan rumus konstanta kesetimbangan dari reaksi-reaksi berikut:

Reaksi 1:



Reaksi 2:



Konstanta kesetimbangan masing-masing reaksi dapat dihitung dengan menggunakan persamaan berikut :

$$\ln K_x = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 T + C_4 \ln T$$

(Jurnal Autsgen dan Rocelle tahun 1991)

Konstanta C pada persamaan tersebut juga diperoleh dari Jurnal Autsgen dan Rochelle tahun 1991, seperti pada Tabel A.6 berikut:

Tabel A.6 Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan

Keterangan	C_1	C_2	C_3	C_4
Reaksi 1	231,465	-12.092,1	-36,7816	0
Reaksi 2	216,049	-12.431,7	-35,4819	0

Sehingga dapat dilakukan perhitungan konstanta kesetimbangan pada masing-masing reaksi kesetimbangan tersebut sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \text{Dengan T sistem} &= 40 \text{ }^\circ\text{C} \\ &= (40 \text{ }^\circ\text{C} + 273.15) \text{ K} \end{aligned}$$

$$= 313,15 \text{ K}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 1:

$$\ln K_1 = 231,465 + \frac{-12.092,1}{313,15} + (-36,7816 \ln 313,15) + (0 \times 313,15)$$

$$= -18,52$$

$$K_1 = 9,04 \cdot 10^{-9}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 2:

$$\ln K_2 = 216,049 + \frac{-12.431,7}{313,15} + (-35,4819 \ln 313,15) + (0 \times 313,15)$$

$$= -27,55$$

$$K_2 = 1,081 \cdot 10^{-12}$$

Hasil perhitungan konstanta kesetimbangan untuk kedua reaksi tersebut dapat dilihat pada Tabel A.7 berikut:

Tabel A.7 Hasil Perhitungan Konstanta Kesetimbangan Pada Analisa Akhir Untuk 5% Mol CO₂ pada suhu 40° C

Keterangan	K _x
Reaksi 1	9,04 · 10 ⁻⁹
Reaksi 2	1,081 · 10 ⁻¹²

Perhitungan CO₂ terlarut dapat dihitung dengan persamaan berikut:

$$[CO_2 \text{ terlarut}] = \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]}$$

dengan:

$$[HCO_3^-] = \frac{\text{mol } HCO_3^-}{V_{\text{larutan}}}$$

$$= \frac{0,07392 \text{ mol}}{20 \text{ ml}}$$

$$= 0,003696 \text{ mol/ml}$$

$$[\text{CO}_3^{2-}] = \frac{\text{mol CO}_3^{2-}}{V_{\text{larutan}}}$$

$$= \frac{0,04656 \text{ mol}}{20 \text{ ml}}$$

$$= 0,002328 \text{ mol/ml}$$

maka:

$$[\text{CO}_2 \text{ terlarut}] = \frac{K_2 [\text{HCO}_3^-]^2}{K_1 [\text{CO}_3^{2-}]}$$

$$= \frac{1,081 \times 10^{-12} \times (0,003696)^2}{9,04 \times 10^{-9} \times 0,002328}$$

$$= 1,753 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mL}$$

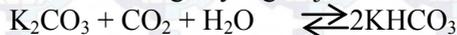
$$\text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} = [\text{CO}_2 \text{ terlarut}] \times V_{\text{larutan}}$$

$$= 1,753 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mL} \times 20 \text{ mL}$$

$$= 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol}$$

a. Menghitung Mol CO₂ yang bereaksi

Reaksi kesetimbangan yang terjadi:



Berdasarkan reaksi kesetimbangan tersebut, dapat dihitung jumlah mol CO₂ yang bereaksi sebagai berikut:

$$\text{Mol CO}_2 \text{ bereaksi} = \frac{1}{2} \times \text{mol HCO}_3^- \text{ akhir}$$

$$= \frac{1}{2} \cdot 0,04656 \text{ mol}$$

$$= 0,02328 \text{ mol}$$

b. Menghitung Mol CO₂ yang terabsorb

$$\text{Mol CO}_2 \text{ terabsorb} = \text{Mol CO}_2 \text{ bereaksi} + \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut}$$

$$= 0,02328 \text{ mol} + 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol}$$

$$= 0,02328 \text{ mol}$$

Menghitung Densitas Larutan:

Untuk menghitung densitas larutan akhir, dilakukan penimbangan massa larutan dengan menggunakan piknometer. Penimbangan tersebut dilakukan sebanyak tiga kali.

Data yang diperoleh sebagai berikut:

Massa pikno dan larutan

$$\text{Massa pikno dan larutan} = 26,2247 \text{ g}$$

Massa larutan

Massa larutan dapat dihitung dengan cara berikut:

$$\begin{aligned} \text{Massa larutan} &= \text{Massa pikno dan larutan} - \text{Massa} \\ \text{pikno kosong} &= 26,2247 \text{ g} - 12,8467 \text{ g} \\ &= 13,378 \text{ g} \end{aligned}$$

Densitas larutan

Densitas larutan dapat dihitung dengan cara berikut:

$$\begin{aligned} \text{Densitas larutan} &= \frac{\text{Massa larutan}}{\text{Volume pikno}} \\ &= \frac{13,378 \text{ g}}{10,0468 \text{ ml}} \\ &= 1,2737 \text{ g/mL} \end{aligned}$$

Menghitung massa tiap-tiap komponen di larutan akhir:

Massa tiap-tiap komponen di larutan akhir dapat dihitung dengan persamaan berikut:

Untuk kalium karbonat (K_2CO_3)

$$\begin{aligned} \text{Mol } \text{K}_2\text{CO}_3 &= \text{Mol } \text{CO}_3^{2-} \\ &= 0,0739 \text{ mol} \end{aligned}$$

$$\text{BM } \text{K}_2\text{CO}_3 = 138 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned} \text{Massa } \text{K}_2\text{CO}_3 &= \text{Mol } \text{K}_2\text{CO}_3 \times \text{BM } \text{K}_2\text{CO}_3 \\ &= 0,0739 \text{ mol} \times 138 \text{ g/mol} \\ &= 10,2 \text{ gram} \end{aligned}$$

Untuk kalium bikarbonat (KHCO₃)

$$\begin{aligned}\text{Mol KHCO}_3 &= \text{Mol HCO}_3^- \\ &= 0,04656 \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\text{BM KHCO}_3 = 100 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned}\text{Massa KHCO}_3 &= \text{Mol KHCO}_3 \times \text{BM KHCO}_3 \\ &= 0,04656 \text{ mol} \times 100 \text{ g/mol} \\ &= 4,66 \text{ gram}\end{aligned}$$

Untuk Methyl diethanolamine (PZ)

$$\text{Massa PZ} = 1,5 \text{ gram}$$

$$\begin{aligned}\text{mol PZ} &= \text{massa PZ} / \text{BM PZ} \\ &= (1,5 \text{ g}) / (86 \text{ g/mol}) \\ &= 0,017 \text{ mol}\end{aligned}$$

Untuk diethanolamine (DEA)

$$\text{Massa DEA} = 6 \text{ g}$$

$$\begin{aligned}\text{mol DEA} &= \text{massa DEA} / \text{BM DEA} \\ &= (6 \text{ g}) / (105 \text{ g/mol}) \\ &= 0,057 \text{ mol}\end{aligned}$$

Untuk gas karbon dioksida (CO₂)

$$\begin{aligned}\text{Mol CO}_2 &= \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} \\ &= 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\text{BM CO}_2 = 44 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned}\text{Massa CO}_2 &= \text{Mol CO}_2 \times \text{BM CO}_2 \\ &= 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \times 44 \text{ g/mol} \\ &= 1,543 \cdot 10^{-4} \text{ gram}\end{aligned}$$

Untuk Air (H₂O)

$$\begin{aligned}\text{Massa H}_2\text{O} &= \text{Massa larutan akhir} - (\text{Massa K}_2\text{CO}_3 + \\ &\quad \text{Massa KHCO}_3 + \text{Massa PZ} + \text{Massa} \\ &\quad \text{DEA} + \text{Massa CO}_2) \\ &= 9,22 \text{ gram}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Mol H}_2\text{O} &= (9,22 \text{ g}) / (18 \text{ g/mol}) \\ &= 0,51 \text{ mol}\end{aligned}$$

Menghitung mol tiap-tiap komponen di larutan akhir:

Mol tiap-tiap komponen di larutan akhir dapat dihitung dengan persamaan berikut:

Untuk ion karbonat (CO_3^{2-})

Berdasarkan titrasi 1 pada analisa larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol CO}_3^{2-} = 0,0739 \text{ mol}$$

Untuk ion bikarbonat (HCO_3^-)

Berdasarkan titrasi 1 pada analisa larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol HCO}_3^- = 0,04656 \text{ mol}$$

Untuk ion kalium (K^+)

$$\begin{aligned} \text{Mol K}^+ &= (2 \times \text{Mol CO}_3^{2-}) + \text{Mol HCO}_3^- \\ &= (2 \times 0,0739 \text{ mol}) + 0,04656 \text{ mol} \\ &= 0,1478 \text{ mol} \end{aligned}$$

Untuk Piperazine (PZ)

$$\text{Mol PZ} = 0,017 \text{ mol}$$

Untuk diethanolamine (DEA)

$$\text{Mol DEA} = 0,0571 \text{ mol}$$

Untuk gas karbon dioksida (CO_2)

Berdasarkan hasil perhitungan mol CO_2 terlarut, diperoleh:

$$\begin{aligned} \text{Mol CO}_2 &= \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} \\ &= 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \end{aligned}$$

Untuk Air (H_2O)

Berdasarkan hasil perhitungan massa H_2O dalam larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol H}_2\text{O} = 0,512 \text{ mol}$$

Untuk Larutan

$$\begin{aligned} \text{Mol Larutan akhir} &= (\text{Mol CO}_3^{2-} + \text{Mol HCO}_3^- + \text{Mol K}^+ \\ &\quad + \text{Mol PZ} + \text{Mol DEA} + \text{Mol CO}_2 \\ &\quad + \text{Mol H}_2\text{O}) \\ &= 0,0739 + 0,04656 + 0,1478 + \\ &\quad 0,0174 + 0,0571 + 3,507 \cdot 10^{-6} + 0,512 \\ &= 0,8549 \text{ mol} \end{aligned}$$

Mol dan komposisi tiap-tiap komponen dapat dilihat pada Tabel A.10.

Tabel A.8 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi di Liquid Untuk 5% Mol CO₂ pada suhu 40° C

Komponen	mol	fraksi mol
CO ₃ ²⁻	0,0739	0,0865
HCO ₃ ⁻	0,0466	0,0545
K ⁺	0,1478	0,1729
PZ	0,0174	0,0204
DEA	0,0571	0,0668
CO ₂	3,507,E-06	4,102E-06
H ₂ O	0,5120	0,5989
total	0,8549	1,0000

Menghitung CO₂ Loading:

CO₂ loading dapat dihitung dengan rumus berikut:

$$\begin{aligned}
 \text{CO}_2 \text{ Loading} &= \frac{\text{mol CO}_2 \text{ terabsorb}}{\text{mol K}^+ + \text{mol PZ} + \text{mol DEA}} \\
 &= \frac{0,02328}{0,1478 + 0,0174 + 0,0571} \\
 &= 0,1047
 \end{aligned}$$

Fraksi mol H₂O di gas :

Air di fasa gas dalam keadaan jenuh sehingga,

$$\begin{aligned}
 P_{H_2O} &= P_{H_2O}^{sat} \\
 &= \exp(16.2620 - (3799.89 / ((T - 273.15) + 226.35)))
 \end{aligned}$$

Pada T = 313,15 K

maka,

$$P_{H_2O}^{sat} = 7355,67 \text{ Pa}$$

Menghitung Tekanan Parsial secara Eksperimen pada larutan :

$$\begin{aligned}
 P_{CO_2} &= H_{CO_2} \cdot x_{CO_2} \\
 &= 3556,4198 \frac{kPa \cdot m^3}{kmol} \cdot 3,507 \cdot 10^{-6} kmol \cdot \frac{1}{2 \cdot 10^{-5} m^3} \\
 &= 0,6236139 kPa \\
 &= 623,6139 Pa
 \end{aligned}$$

Berikut penabelan hasil perhitungan komposisi masing-masing komponen di liquid :

Tabel A.9 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas CO₂ 5%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0696	0,0726	0,0727	0,0768	0,0739	0,0786
HCO ₃ ⁻	0,0468	0,0488	0,0466	0,0491	0,0463	0,0493
K ⁺	0,1392	0,1452	0,1454	0,1535	0,1478	0,1572
PZ	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0745	0,0714	0,0754	0,0714	0,0759
CO ₂	3,481 · 10 ⁻⁶	3,6322 · 10 ⁻⁶	3,565 · 10 ⁻⁶	3,763 · 10 ⁻⁶	3,739 · 10 ⁻⁶	3,976 · 10 ⁻⁶
H ₂ O	0,6313	0,6588	0,6112	0,6452	0,6010	0,6390
Total	0,9584	1,0000	0,9474	1,0000	0,9405	1,0000

Tabel A.10 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas CO₂ 5%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0713	0,0821	0,0739	0,0865	0,0746	0,0878
HCO ₃ ⁻	0,0470	0,0542	0,0466	0,0545	0,0463	0,0545
K ⁺	0,1426	0,1642	0,1478	0,1729	0,1493	0,1756
PZ	0,0174	0,0201	0,0174	0,0204	0,0174	0,0205
DEA	0,0571	0,0658	0,0571	0,0668	0,0571	0,0672
CO ₂	3,434.10 ⁻⁶	3,956.10 ⁻⁶	3,507.10 ⁻⁶	4,102.10 ⁻⁶	3,703.10 ⁻⁶	4,356.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5326	0,6136	0,5120	0,5989	0,5053	0,5944
Total	0,8681	1,0000	0,8549	1,0000	0,8501	1,0000

Tabel A.11 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas CO₂ 5%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0737	0,0955	0,0754	0,0984	0,0749	0,0912
HCO ₃ ⁻	0,0470	0,0610	0,0468	0,0611	0,0466	0,0567
K ⁺	0,1474	0,1910	0,1507	0,1968	0,1498	0,1823
PZ	0,0348	0,0451	0,0348	0,0455	0,0348	0,0424
DEA	0,0429	0,0555	0,0429	0,0560	0,0429	0,0522
CO ₂	3,322.10 ⁻⁶	4,306.10 ⁻⁶	3,476.10 ⁻⁶	4,538.10 ⁻⁶	3,729.10 ⁻⁶	4,541.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4258	0,5518	0,4153	0,5423	0,4725	0,5752
Total	0,7715	1,0000	0,7659	1,0000	0,8213	1,0000

Tabel A.12 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas CO₂ 5%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0768	0,1140	0,0787	0,1183	0,0778	0,1159
HCO ₃ ⁻	0,0475	0,0705	0,0470	0,0707	0,0470	0,0701
K ⁺	0,1536	0,2280	0,1574	0,2366	0,1555	0,2317
PZ	0,0522	0,0775	0,0522	0,0785	0,0522	0,0778
DEA	0,0286	0,0424	0,0286	0,0429	0,0286	0,0426
CO ₂	3,252.10 ⁻⁶	4,827.10 ⁻⁶	3,361.10 ⁻⁶	5,052.10 ⁻⁶	3,666.10 ⁻⁶	5,461.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,3151	0,4676	0,3013	0,4528	0,3101	0,4620
Total	0,6738	1,0000	0,6653	1,0000	0,7558	1,0000

Tabel A.13 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas 10%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0648	0,0672	0,0679	0,0712	0,0698	0,0741
HCO ₃ ⁻	0,0504	0,0523	0,0502	0,0526	0,0499	0,0529
K ⁺	0,1296	0,1344	0,1358	0,1425	0,1397	0,1481
PZ	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0741	0,0714	0,0749	0,0714	0,0757
CO ₂	4,336.10 ⁻⁶	4,496.10 ⁻⁶	4,430.10 ⁻⁶	4,646.10 ⁻⁶	4,597.10 ⁻⁶	4,874.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,6481	0,6721	0,6280	0,6587	0,6122	0,6492
Total	0,9644	1,0000	0,9534	1,0000	0,9431	1,0000

Tabel A.14 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas 10%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0665	0,0761	0,0691	0,0803	0,0710	0,0835
HCO ₃ ⁻	0,0506	0,0579	0,0502	0,0583	0,0490	0,0587
K ⁺	0,1330	0,1521	0,1382	0,1606	0,1421	0,1671
PZ	0,0174	0,0199	0,0174	0,0202	0,0174	0,0205
DEA	0,0571	0,0654	0,0571	0,0664	0,0571	0,0672
CO ₂	4,267.10 ⁻⁶	4,882.10 ⁻⁶	4,353.10 ⁻⁶	5,056.10 ⁻⁶	4,519.10 ⁻⁶	5,313.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5494	0,6286	0,5288	0,6143	0,5129	0,6030
Total	0,8741	1,0000	0,8609	1,0000	0,8505	1,0000

Tabel A.15 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas 10%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0689	0,0886	0,0703	0,0910	0,0730	0,0896
HCO ₃ ⁻	0,0506	0,0651	0,0504	0,0652	0,0502	0,0616
K ⁺	0,1378	0,1772	0,1406	0,1819	0,1459	0,1793
PZ	0,0348	0,0448	0,0348	0,0451	0,0348	0,0428
DEA	0,0429	0,0551	0,0429	0,0554	0,0429	0,0527
CO ₂	4,118.10 ⁻⁶	5,297.10 ⁻⁶	4,320.10 ⁻⁶	5,588.10 ⁻⁶	4,442.10 ⁻⁶	5,458.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4426	0,5692	0,4339	0,5614	0,4672	0,5740
Total	0,7775	1,0000	0,7730	1,0000	0,8139	1,0000

Tabel A.16 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas 10%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0715	0,1047	0,0739	0,1101	0,0768	0,1163
HCO ₃ ⁻	0,0509	0,0745	0,0506	0,0754	0,0504	0,0763
K ⁺	0,1430	0,2094	0,1478	0,2202	0,1536	0,2326
PZ	0,0522	0,0765	0,0522	0,0778	0,0522	0,0791
DEA	0,0286	0,0418	0,0286	0,0426	0,0286	0,0433
CO ₂	4,004.10 ⁻⁶	5,861.10 ⁻⁶	4,149.10 ⁻⁶	6,180.10 ⁻⁶	4,261.10 ⁻⁶	6,452.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,3369	0,4922	0,3181	0,4738	0,2988	0,4524
Total	0,6832	1,0000	0,6713	1,0000	0,6604	1,0000

Tabel A.17 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas 20%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0600	0,0612	0,0631	0,0655	0,0650	0,0681
HCO ₃ ⁻	0,0588	0,0600	0,0583	0,0606	0,0581	0,0608
K ⁺	0,1200	0,1224	0,1262	0,1311	0,1301	0,1362
PZ	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0728	0,0714	0,0742	0,0714	0,0748
CO ₂	6,374.10 ⁻⁶	6,501.10 ⁻⁶	6,444.10 ⁻⁶	7690.10 ⁻⁶	6,997.10 ⁻⁶	6,997.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,6703	0,6836	0,6440	0,6687	0,6302	0,6600
Total	0,9805	1,0000	0,9631	1,0000	0,9548	1,0000

Tabel A.18 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas 20%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0617	0,0700	0,0643	0,0739	0,0662	0,0769
HCO ₃ ⁻	0,0590	0,0670	0,0586	0,0673	0,0583	0,0677
K ⁺	0,1234	0,1400	0,1286	0,1478	0,1325	0,1503
PZ	0,0174	0,0198	0,0174	0,0200	0,0174	0,0202
DEA	0,0571	0,0648	0,0571	0,0656	0,0571	0,0663
CO ₂	6,251.10 ⁻⁶	7,092.10 ⁻⁶	6,376.10 ⁻⁶	7,323.10 ⁻⁶	6,615.10 ⁻⁶	7,677.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5628	0,6385	0,5446	0,6255	0,5300	0,6151
Total	0,8814	1,0000	0,8706	1,0000	0,8616	1,0000

Tabel A.19 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas 20%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0641	0,0802	0,0655	0,0825	0,0682	0,0886
HCO ₃ ⁻	0,0590	0,0739	0,0588	0,0740	0,0586	0,0761
K ⁺	0,1282	0,1603	0,1310	0,1650	0,1363	0,1771
PZ	0,0348	0,0436	0,0348	0,0439	0,0348	0,0453
DEA	0,0429	0,0536	0,0429	0,0540	0,0429	0,0557
CO ₂	6,017.10 ⁻⁶	7,528.10 ⁻⁶	6,310.10 ⁻⁶	7,946.10 ⁻⁶	6,481.10 ⁻⁶	8,421.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4703	0,5884	0,4611	0,5806	0,4289	0,5573
Total	0,7993	1,0000	0,7941	1,0000	0,7697	1,0000

Tabel A.20 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas 20%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0667	0,0918	0,0691	0,0997	0,0720	0,1061
HCO ₃ ⁻	0,0593	0,0816	0,0590	0,0851	0,0588	0,0867
K ⁺	0,1334	0,1836	0,1382	0,1993	0,1440	0,2112
PZ	0,0522	0,0719	0,0522	0,0753	0,0522	0,0770
DEA	0,0286	0,0393	0,0286	0,0412	0,0286	0,0421
CO ₂	5,826.10 ⁻⁶	8,018.10 ⁻⁶	6,031.10 ⁻⁶	8,695.10 ⁻⁶	6,186.10 ⁻⁶	9,116.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,3864	0,5317	0,3464	0,4994	0,3229	0,4759
Total	0,7266	1,0000	0,6936	1,0000	0,6785	1,0000

A.2 Perhitungan dengan Persamaan Korelasi E-NRTL

Tahap korelasi ini dilakukan untuk menghitung koefisien aktivitas H₂O dan CO₂ dengan menggunakan persamaan model E-NRTL. Persamaan model E-NRTL yang digunakan adalah untuk *molekular species* karena H₂O dan CO₂ berbentuk *molekular species*

Berikut contoh perhitungan dan penabelan hasil perhitungan:

- Sebagai contoh perhitungan, diambil variabel larutan 30% massa K₂CO₃, dengan 1% massa PZ dan 4% massa DEA pada suhu 30°C dengan komposisi gas 10%. Contoh perhitungannya sebagai berikut:

Dari eksperimen diperoleh data komposisi (fraksi mol) tiap-tiap komponen di fase liquid yang dapat dilihat pada Tabel A.14

Menghitung C_i, dimana:

C_i = z_i (jumlah muatan) untuk *ionic species*

Tabel A.21 Hasil Perhitungan C_i Untuk 1% PZ 4% DEA

No.	Spesies	C_i
1.	CO_3^{2-}	-2
2.	HCO_3^-	-1
3.	K^+	1
4.	PZ	1
5.	DEA	1
6.	CO_2	1
7.	H_2O	1

Menghitung X_{i_1} :

Sehingga:

$$\begin{aligned} X_{\text{CO}_2} &= C_{\text{CO}_2} \cdot x_{\text{CO}_2} \\ &= 1 \times 5,056 \cdot 10^{-6} \\ &= 5,056 \cdot 10^{-6} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{H}_2\text{O}} &= C_{\text{H}_2\text{O}} \cdot x_{\text{H}_2\text{O}} \\ &= 1 \times 0,6143 \\ &= 0,6143 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{PZ}} &= C_{\text{PZ}} \cdot x_{\text{PZ}} \\ &= 1 \times 0,0202 \\ &= 0,0202 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{DEA}} &= C_{\text{DEA}} \cdot x_{\text{DEA}} \\ &= 1 \times 0,0664 \\ &= 0,0664 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{K}^+} &= C_{\text{K}^+} \cdot x_{\text{K}^+} \\ &= 1 \times 0,1606 \\ &= 0,1606 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{CO}_3^{2-}} &= C_{\text{CO}_3^{2-}} \cdot x_{\text{CO}_3^{2-}} \\ &= -2 \times 0,0803 \\ &= -0,1606 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{HCO}_3^-} &= C_{\text{HCO}_3^-} \cdot x_{\text{HCO}_3^-} \\ &= -1 \times 0,0583 \\ &= -0,0583 \end{aligned}$$

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antara Molekul-Pasangan Ion dan Pasangan Ion-Molekul

Menghitung jumlah fraksi komposisi muatan anion, Y_a dan jumlah fraksi komposisi muatan kation, Y_c , sebagai berikut :

Sehingga:

$$Y_{CO_3^{2-}} = \frac{X_{CO_3^{2-}}}{X_{CO_3^{2-}} + X_{HCO_3^-} - 0,1606}$$

$$= \frac{-0,1606}{-0,1606 + -0,0583}$$

$$= 0,7338$$

$$Y_{HCO_3^-} = 1 - 0,7338$$

$$= 0,2662$$

$$Y_{K^+} = \frac{X_{K^+}}{X_{K^+}}$$

$$= 1$$

Diketahui *nonrandomness parameter* dari Cullinane (2005):

Tabel A.22 Data *Nonrandomness Parameter*

Interaksi	α	Harga α
Molekul-Molekul	$\alpha_{m,m'}$	0,2
H ₂ O-Pasangan ion	$\alpha_{H_2O,ca}$	0,2
Pasangan ion-H ₂ O	α_{ca,H_2O}	0,2
PZ-Pasangan ion	$\alpha_{PZ,ca}$	0,1
DEA-Pasangan ion	$\alpha_{DEA,ca}$	0,1
CO ₂ - Pasangan ion	$\alpha_{CO_2,ca}$	0,1

Dari hasil fitting diperoleh konstanta *Binary Interaction Parameter* antar molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul seperti pada Tabel A.23 untuk sistem PZ-DEA

Tabel A.23 Data Konstanta *Binary Interaction Parameter* antar Molekul-Pasangan ion dan Pasangan Ion-Molekul untuk Sistem PZ-DEA

interaksi	A	B
$\text{H}_2\text{O}-\text{K}^+, \text{CO}_3^-$	12,4147	1582,0155
$\text{K}^+, \text{CO}_3^- - \text{H}_2\text{O}$	21,8084	-376,9975
$\text{H}_2\text{O}-\text{K}^+, \text{HCO}_3^-$	14,6031	2862,9845
$\text{K}^+, \text{HCO}_3^- - \text{H}_2\text{O}$	-4,3939	-600,8536
$\text{CO}_2-\text{K}^+, \text{CO}_3^-$	80,9726	0,0209
$\text{K}^+, \text{CO}_3^- - \text{CO}_2$	73,5904	0,0223
$\text{CO}_2-\text{K}^+, \text{HCO}_3^-$	28,8741	0,0018
$\text{K}^+, \text{HCO}_3^- - \text{CO}_2$	11,2491	0,0090
$\text{PZ}-\text{K}^+, \text{CO}_3^-$	24,1544	0,0051
$\text{K}^+, \text{CO}_3^- - \text{PZ}$	-0,5691	-0,0028
$\text{PZ}-\text{K}^+, \text{HCO}_3^-$	16,0216	0,0094
$\text{K}^+, \text{HCO}_3^- - \text{PZ}$	-9,0928	0,0026
$\text{DEA}-\text{K}^+, \text{CO}_3^-$	8,8020	-0,0005
$\text{K}^+, \text{CO}_3^- - \text{DEA}$	-8,0502	0,0056
$\text{DEA}-\text{K}^+, \text{HCO}_3^-$	13,5856	0,0171
$\text{K}^+, \text{HCO}_3^- - \text{DEA}$	-4,0565	-0,0066

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO_2 :

maka,

molekular

= CO_2

anion

= CO_3^- , HCO_3^-

cation

= K^+

Dari eksperimen didapatkan suhu sistem pada saat terjadi kesetimbangan:

$$T \text{ sistem} = 40^{\circ}\text{C} = 313,15 \text{ K}$$

Rumus yang digunakan untuk menghitung *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul adalah :

Menghitung $\tau_{ca,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi pasangan ion-molekul yaitu $\text{K}^+, \text{CO}_3^{=} - \text{CO}_2$ dengan data sebagai berikut:

$$A = 73,5904 ; \quad B = 0,0223$$

sehingga:

$$\begin{aligned} \tau_{ca,m} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 73,5904 + 0,0223 \left[\frac{1}{313,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 73,590 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi pasangan ion-molekul yaitu $\text{K}^+, \text{HCO}_3^- - \text{CO}_2$ dengan data sebagai berikut:

$$A = 11,2491 ; \quad B = 0,0090$$

Sehingga:

$$\begin{aligned} \tau_{ca,m} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 11,2491 + 0,0090 \left[\frac{1}{313,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 11,249 \end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{m,ca}$

Untuk anion (a) CO₃⁼

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-pasangan ion yaitu CO₂-pasangan ion lain dengan data sebagai berikut:

$$A = 80,9726$$

$$B = 0,0209$$

sehingga:

$$\begin{aligned}\tau_{m,ca} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 80,9726 + 0,0209 \left[\frac{1}{313,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 80,973\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO₃⁻

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-pasangan ion yaitu CO₂-pasangan ion lain dengan data sebagai berikut:

$$A = 28,8741$$

$$B = 0,0018$$

sehingga:

$$\begin{aligned}\tau_{m,ca} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 28,8741 + 0,0018 \left[\frac{1}{313,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 28,874\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{m,ca}$

Untuk anion (a) CO₃⁼

$$\begin{aligned}\alpha_{m,ca} &= \alpha_{CO_2,ca} \\ &= 0,1\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{m,ca} &= \alpha_{\text{CO}_2,ca} \\ &= 0,1\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{c,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}\alpha_{c,m} &= \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \\ &= [Y_{\text{CO}_3^{=}} \times \alpha_{m,ca} \text{ (a = CO}_3^{=})] \\ &= 0,072\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{c,m} &= \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \\ &= [Y_{\text{HCO}_3^-} \times \alpha_{m,ca} \text{ (a = HCO}_3^-)] \\ &= 0,028\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{a,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}\alpha_{a,m} &= \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \\ &= Y_{\text{K}^+} \times \alpha_{m,ca} \\ &= 1 \times 0,1 = 0,1\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{a,m} &= \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \\ &= Y_{\text{K}^+} \times \alpha_{m,ca} \\ &= 1 \times 0,1 = 0,1\end{aligned}$$

Menghitung $G_{ca,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}G_{ca,m} &= \exp(-\alpha_{ca,m} \tau_{ca,m}) \\ &= \exp(-0,072 \times 73,590)\end{aligned}$$

$$= 0,0001$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned} G_{ca,m} &= \exp(-\alpha_{ca,m} \tau_{ca,m}) \\ &= \exp(-0,028 \times 11,249) \\ &= 0,325 \end{aligned}$$

Menghitung $G_{c,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned} G_{c,m} &= \sum_a Y_a G_{ca,m} \\ &= [Y_{\text{CO}_3^{2-}} \times G_{ca,m} \text{ (a = CO}_3^{2-})}] \\ &= (0,7338 \times 0,001) \\ &= 0,0007 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned} G_{c,m} &= \sum_a Y_a G_{ca,m} \\ &= [Y_{\text{HCO}_3^-} \times G_{ca,m} \text{ (a = HCO}_3^-)] \\ &= (0,2662 \times 0,325) \\ &= 0,091 \end{aligned}$$

Menghitung $G_{a,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned} G_{a,m} &= \sum_c Y_c G_{ca,m} \\ &= Y_{K^+} \times G_{ca,m} \\ &= 1 \times 0,001 \\ &= 0,001 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned} G_{a,m} &= \sum_c Y_c G_{ca,m} \\ &= Y_{K^+} \times G_{ca,m} \end{aligned}$$

$$= 1 \times 0,325$$

$$= 0,325$$

Menghitung $\tau_{c,m}$

$$G = \exp(-\alpha\tau)$$

$$\ln G = -\alpha\tau$$

$$\tau = -\frac{\ln G}{\alpha}$$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\tau_{c,m} = -\frac{\ln G_{c,m}}{\alpha_{c,m}}$$

$$= -\frac{\ln(0,0007)}{0,1}$$

$$= 106,772$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\tau_{c,m} = -\frac{\ln G_{c,m}}{\alpha_{c,m}}$$

$$= -\frac{\ln(0,091)}{0,1}$$

$$= 85,638$$

Menghitung $\tau_{a,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\tau_{a,m} = -\frac{\ln G_{a,m}}{\alpha_{a,m}}$$

$$= -\frac{\ln(0,001)}{0,1}$$

$$= 73,590$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\tau_{a,m} &= -\frac{\ln G_{a,m}}{\alpha_{a,m}} \\ &= -\frac{\ln(0,325)}{0,1} \\ &= 11,249\end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{mc,ac}$
Dari Cullinane (2005):

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm}$$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}\tau_{mc,ac} &= \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 117,025\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\tau_{mc,ac} &= \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 148,585\end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{ma,ca}$

Dari Cullinane (2005):

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am}$$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}\tau_{ma,ca} &= \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 80,973\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\tau_{ma,ca} = \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca})$$

$$= 28,874$$

Menghitung $G_{mc,ac}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$G_{mc,ac} = \exp(-\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \\ = 0,0002$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$G_{mc,ac} = \exp(-\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \\ = 0,016$$

Menghitung $G_{ma,ca}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$G_{ma,ca} = \exp(-\alpha_{am} \tau_{ma,ca}) \\ = 0,0003$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$G_{ma,ca} = \exp(-\alpha_{am} \tau_{ma,ca}) \\ = 0,056$$

Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO_2 tersebut dapat dilihat pada Tabel A.24.

Tabel A.24 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:CO₂)

Parameter	m = CO ₂ , c = K+	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁼
Y _a	0,736	0,264
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	73,590	11,249
τ _{m,ca}	80,973	28,874
α _{ca,m}	0,100	0,100
α _{m,ca}	0,100	0,100
α _{c,m}	0,074	0,026
α _{a,m}	0,100	0,100
G _{ca,m}	0,001	0,325
G _{c,m}	0,0005	0,086
G _{a,m}	0,001	0,325
τ _{c,m}	104,123	93,147
τ _{a,m}	73,590	11,249
τ _{mc,ac}	114,151	159,954
τ _{ma,ca}	80,973	28,874
G _{mc,ac}	0,0002	0,015
G _{ma,ca}	0,0003	0,056

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul H₂O dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul H₂. Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.25.

Tabel A.25 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:H₂O)

Parameter	m = H ₂ O, c = K ⁺	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁼
Y _a	0,736	0,264
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	21,672	-4,611
τ _{m,ca}	12,987	15,639
α _{ca,m}	0,200	0,200
α _{m,ca}	0,200	0,200
α _{c,m}	0,147	0,053
α _{a,m}	0,200	0,200
G _{ca,m}	0,013	2,515
G _{c,m}	0,010	0,663
G _{a,m}	0,013	2,515
τ _{c,m}	31,519	7,775
τ _{a,m}	21,672	-4,611
τ _{mc,ac}	19,721	84,532
τ _{ma,ca}	12,987	15,639
G _{mc,ac}	0,055	0,012
G _{ma,ca}	0,074	0,044

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul DEA dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.26 berikut:

Tabel A.26 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:DEA)

Parameter	m = DEA, c = K+	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻
Ya	0,736	0,264
Yc	1,000	1,000
$\tau_{ca,m}$	-7,151	-5,528
$\tau_{m,ca}$	9,790	15,233
$\alpha_{ca,m}$	0,100	0,100
$\alpha_{m,ca}$	0,100	0,100
$\alpha_{c,m}$	0,074	0,026
$\alpha_{a,m}$	0,100	0,100
G _{ca,m}	2,044	1,738
G _{c,m}	1,505	0,459
G _{a,m}	2,044	1,738
$\tau_{c,m}$	-5,553	29,556
$\tau_{a,m}$	-7,151	-5,528
$\tau_{mc,ac}$	17,459	108,247
$\tau_{ma,ca}$	9,790	15,233
G _{mc,ac}	0,277	0,058
G _{ma,ca}	0,376	0,218

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul PZ dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.27

Tabel A.27 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:PZ)

Parameter	m = PZ, c = K+	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁼
Y _a	0,736	0,264
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	-1,016	-7,509
τ _{m,ca}	24,542	18,247
α _{ca,m}	0,100	0,100
α _{m,ca}	0,100	0,100
α _{c,m}	0,074	0,026
α _{a,m}	0,100	0,100
G _{ca,m}	1,107	2,119
G _{c,m}	0,815	0,559
G _{a,m}	1,107	2,119
τ _{c,m}	2,780	22,044
τ _{a,m}	-1,016	-7,509
τ _{mc,ac}	37,497	119,672
τ _{ma,ca}	24,542	18,247
G _{mc,ac}	0,063	0,043
G _{ma,ca}	0,086	0,161

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antar Molekul

Diketahui *Binary interaction parameter* dari hasil fitting seperti pada Tabel A.28.

Tabel A.28 Data Konstanta *Binary Interaction Parameter* antar Molekul

Interaksi	A	B
CO ₂ -H ₂ O	48,792	-8428,918
H ₂ O-CO ₂	-2,772	1080,043
H ₂ O-PZ	-9,311	-0,026
PZ-H ₂ O	-1,773	-0,040
PZ-CO ₂	5,198	0,021
CO ₂ -PZ	0,000	0,000
H ₂ O-DEA	-7,696	1317,608
DEA-H ₂ O	0,916	-718,126
DEA-CO ₂	12,905	0,025
CO ₂ -DEA	-0,568	-0,001
DEA-PZ	-0,755	-0,002
PZ-DEA	-4,776	-0,016

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antar molekul untuk molekul CO₂:

molekular = CO₂, H₂O, PZ dan DEA

Dari eksperimen didapatkan suhu sistem pada saat terjadi kesetimbangan:

$$\begin{aligned} T \text{ sistem} &= 40^{\circ}\text{C} \\ &= (40^{\circ}\text{C} + 273,15) \text{ K} \\ &= 313,15 \text{ K} \end{aligned}$$

Rumus yang digunakan untuk menghitung *Binary Interaction Parameter* antar molekul adalah :

Menghitung $\tau_{m,m'}$

Untuk $m' \text{ CO}_2$

Binary Interaction Parameter antar molekul CO₂- CO₂:

$$\tau_{m,m'} = 0$$

Untuk $m' \text{ H}_2\text{O}$, $m' \text{ PZ}$, $m' \text{ DEA}$

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-molekul yaitu CO₂- H₂O, CO₂- PZ, CO₂-DEA dengan persamaan berikut:

$$\tau_{m,m'} = A + \frac{B}{T(K)}$$

Menghitung $\alpha_{m,m'}$

Untuk m' CO₂

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- CO₂:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' H₂O

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- H₂O:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' PZ

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- PZ:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' DEA

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- DEA:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Menghitung G_{m,m'}

Untuk m' CO₂, m' H₂O, m' PZ, m' DEA

$$G_{m,m'} = \exp(-\alpha_{m,m'}\tau_{m,m'})$$

Binary Interaction Parameter antar molekul untuk molekul H₂O, PZ dan DEA dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antar molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat ditabelkan sebagai berikut:

Tabel A.29 Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antar Molekul

m	m' = CO ₂		m' = H ₂ O		m' = DEA		m' =PZ	
	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'
H ₂ O	0,000	1,000	0,791	0,854	-3,350	1,954	-9,311	6,438
CO ₂	20,987	0,015	0,000	1,000	-0,568	1,120	0,000	1,000
DEA	-1,453	1,337	12,905	0,076	0,000	1,000	-0,755	1,163
PZ	-1,773	1,426	5,198	0,354	-4,776	2,599	0,000	1,000

Menghitung Koefisien Aktivitas H₂O dan CO₂

Perhitungan koefisien aktivitas H₂O dan CO₂ sebagai berikut :

Menghitung $\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}$

$$\begin{aligned} \sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm} = & X_{CO_2} G_{CO_2, H_2O} \tau_{CO_2, H_2O} + X_{H_2O} G_{H_2O, H_2O} \tau_{H_2O, H_2O} \\ & + X_{PZ} G_{PZ, H_2O} \tau_{PZ, H_2O} + \\ & X_{DEA} G_{DEA, H_2O} \tau_{DEA, H_2O} + \\ & X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, H_2O} \tau_{CO_3^{2-}, H_2O} + \\ & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, H_2O} \tau_{HCO_3^-, H_2O} \\ & + X_{K^+} G_{K^+, H_2O} \tau_{K^+, H_2O} \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km}$

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km} = & X_{CO_2} G_{CO_2, H_2O} + X_{H_2O} G_{H_2O, H_2O} + X_{PZ} G_{PZ, H_2O} + \\ & X_{DEA} G_{DEA, H_2O} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, H_2O} + \end{aligned}$$

$$X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, H_2O} + X_{K^+} G_{K^+, H_2O}$$

Menghitung
$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}}$$

Untuk m' = CO₂

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{CO_2} G_{H_2O, CO_2}}{X_{CO_2} G_{CO_2, CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O, CO_2} + X_{PZ} G_{PZ, CO_2} + X_{DEA} G_{DEA, CO_2} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, CO_2} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, CO_2} + X_{K^+} G_{K^+, CO_2}}$$

Untuk m' = PZ

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{PZ} G_{H_2O, PZ}}{X_{CO_2} G_{CO_2, PZ} + X_{H_2O} G_{H_2O, PZ} + X_{PZ} G_{PZ, PZ} + X_{DEA} G_{DEA, PZ} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, PZ} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, PZ} + X_{K^+} G_{K^+, PZ}}$$

Untuk m' = DEA

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{DEA} G_{H_2O, DEA}}{X_{CO_2} G_{CO_2, DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O, DEA} + X_{PZ} G_{PZ, DEA}}$$

$$\frac{+ X_{DEA} G_{DEA,DEA} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},DEA}}{+ X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,DEA} + X_{K^+} G_{K^+,DEA}}$$

Menghitung $\tau_{m,m'}$

Untuk $m' = CO_2$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,CO_2}$$

Untuk $m' = PZ$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,PZ}$$

Untuk $m' = DEA$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,DEA}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}$

Untuk $m' = CO_2$

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'} &= X_{CO_2} G_{CO_2,CO_2} \tau_{CO_2,CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O,CO_2} \tau_{H_2O,CO_2} + \\ &X_{PZ} G_{PZ,CO_2} \tau_{PZ,CO_2} + X_{DEA} G_{DEA,CO_2} \tau_{DEA,CO_2} + \\ &X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},CO_2} \tau_{CO_3^{2-},CO_2} + \\ &X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,CO_2} \tau_{HCO_3^-,CO_2} + X_{K^+} G_{K^+,CO_2} \tau_{K^+,CO_2} \end{aligned}$$

Untuk $m' = PZ$

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'} &= X_{CO_2} G_{CO_2,PZ} \tau_{CO_2,PZ} + X_{H_2O} G_{H_2O,PZ} \tau_{H_2O,PZ} + \\ &X_{PZ} G_{PZ,PZ} \tau_{PZ,MDEA} + X_{DEA} G_{DEA,PZ} \tau_{DEA,PZ} + \end{aligned}$$

$$X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},PZ} \tau_{CO_3^{2-},PZ} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,PZ} \tau_{HCO_3^-,PZ} + X_{K^+} G_{K^+,PZ} \tau_{K^+,PZ}$$

Untuk m' = DEA

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2,DEA} \tau_{CO_2,DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O,DEA} \tau_{H_2O,DEA} + \\ & X_{PZ} G_{PZ,DEA} \tau_{PZ,DEA} + \\ & X_{DEA} G_{DEA,DEA} \tau_{DEA,DEA} + \\ & X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},DEA} \tau_{CO_3^{2-},DEA} + \\ & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,DEA} \tau_{HCO_3^-,DEA} + \\ & X_{K^+} G_{K^+,DEA} \tau_{K^+,DEA} \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km'}$

Untuk m' = CO₂

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2,CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O,CO_2} + X_{PZ} G_{PZ,CO_2} + \\ & X_{DEA} G_{DEA,CO_2} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},CO_2} + \\ & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,CO_2} + X_{K^+} G_{K^+,CO_2} \end{aligned}$$

Untuk m' = PZ

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2,PZ} + X_{H_2O} G_{H_2O,PZ} + X_{PZ} G_{PZ,PZ} + \\ & X_{DEA} G_{DEA,PZ} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},PZ} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,PZ} + \\ & X_{K^+} G_{K^+,PZ} \end{aligned}$$

Untuk m' = DEA

$$\sum_k X_k G_{km'} = X_{CO_2} G_{CO_2, DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O, DEA} + X_{PZ} G_{PZ, DEA} + X_{DEA} G_{DEA, DEA} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, DEA} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, DEA} + X_{K^+} G_{K^+, DEA}$$

Menghitung $\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}}$

Untuk a = CO₃²⁻

$$\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}} = \frac{Y_{CO_3^{2-}} X_{K^+} G_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+}}{X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-}, CO_3^{2-}-K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-}, CO_3^{2-}-K^+} + X_{PZ} G_{PZ-CO_3^{2-}, CO_3^{2-}-K^+} + X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-}, CO_3^{2-}-K^+}}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}} = \frac{Y_{HCO_3^-} X_{K^+} G_{H_2O-K^+, HCO_3^- -K^+}}{X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, HCO_3^- -K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, HCO_3^- -K^+} + X_{PZ} G_{PZ-HCO_3^-, HCO_3^- -K^+} + X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, HCO_3^- -K^+}}$$

Menghitung $\tau_{mc,ac}$

Untuk a = CO₃²⁻

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{H_2O-K^+, HCO_3^- -K^+}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}$

Untuk a = CO₃²⁻

$$\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac} = X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{CO_2-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

$$X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

$$X_{PZ} G_{PZ-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{PZ-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

$$X_{DEA} G_{DEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{DEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac} = X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, HCO_3^- -K^+} \tau_{CO_2-K^+, HCO_3^- -K^+} +$$

$$X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, HCO_3^- -K^+} \tau_{H_2O-K^+, HCO_3^- -K^+} +$$

$$X_{PZ} G_{PZ-K^+, HCO_3^- -K^+} \tau_{PZ-K^+, HCO_3^- -K^+} +$$

$$X_{DEA} G_{DEA-K^+, HCO_3^- -K^+} \tau_{DEA-K^+, HCO_3^- -K^+}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{kc,ac}$

Untuk a = CO₃⁼

$$\sum_k X_k G_{kc,ac} = X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, CO_3^{2-}-K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

$$X_{PZ} G_{PZ-K^+, CO_3^{2-}-K^+} + X_{DEA} G_{DEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_k X_k G_{kc,ac} = X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, HCO_3^- -K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, HCO_3^- -K^+} +$$

$$X_{PZ} G_{PZ-K^+, HCO_3^- -K^+} + X_{DEA} G_{DEA-K^+, HCO_3^- -K^+} +$$

Menghitung $\sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}}$

Untuk a = CO₃⁼

$$\sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} = \frac{Y_{K^+} X_{CO_3^{2-}} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}}{X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}}$$

$$\begin{aligned}
 & + X_{PZ} G_{PZ-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} X_{DEA} G_{DEA-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} \\
 \text{Untuk } a = HCO_3^- & \\
 \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} &= \frac{Y_{K^+} X_{HCO_3^-} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}}{X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}} \\
 & + X_{PZ} G_{PZ-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}
 \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}$

Untuk $a = CO_3^2-$

$$\begin{aligned}
 \sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca} &= X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} \tau_{CO_2-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} + \\
 & X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} \tau_{H_2O-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} + \\
 & X_{PZ} G_{PZ-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} \tau_{PZ-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} + \\
 & X_{DEA} G_{DEA-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-} \tau_{DEA-CO_3^2-, K^+-CO_3^2-}
 \end{aligned}$$

Untuk $a = HCO_3^-$

$$\begin{aligned}
 \sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca} &= X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\
 & X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\
 & X_{PZ} G_{PZ-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{PZ-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\
 & X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}
 \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{ka,ca}$

Untuk $a = CO_3^2-$

$$\sum_k X_k G_{ka,ca} = X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-},K^+-CO_3^{2-}} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-},K^+-CO_3^{2-}} + X_{PZ} G_{PZ-CO_3^{2-},K^+-CO_3^{2-}} + X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-},K^+-CO_3^{2-}}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_k X_k G_{ka,ca} = X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-,K^+-HCO_3^-} + X_{PZ} G_{PZ-HCO_3^-,K^+-HCO_3^-} + X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-,K^+-HCO_3^-} + X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-,K^+-HCO_3^-}$$

Perhitungan koefisien aktivitas H₂O dapat dilihat pada Tabel A.30 dan untuk perhitungan koefisien aktivitas CO₂ dapat dilihat pada Tabel A.31.

Tabel A.30 Perhitungan Koefisien Aktivitas H₂O

No.	Persamaan E-NRTL	Hasil Perhitungan		
		m' = CO ₂	m' = DEA	m' = DEA
1a	$\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}$	0,660		
1b	$\sum_k X_k G_{km}$	0,515		
1c	1a / 1c	1,283		
		m' = CO ₂	m' = DEA	m' = DEA
2a	$\frac{\sum X_{m'} G_{mm'}}{m' \sum_k X_k G_{km'}}$	8,46E-06	0,1060325	0,0825
2b	$\tau m, m'$	1,605	0,404	-8,649
2c	$\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}$	0,390	2,297	-25,7561
2d	$\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}$	19,424	0,482	3,080263
2e	$2a \left(2b - \frac{2c}{2d} \right)$	-0,226	-0,042388	1,4E-01
2f	Jumlah 2e	-0,268		
		a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻	-

Tabel A.31 Perhitungan Koefisien Aktivitas H₂O (lanjutan)

No.	Persamaan E-NRTL	Hasil Perhitungan		
3a	$\sum_c \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}}$	0,000	0,000	-
3b	$\tau_{mc,ac}$	114,151	159,954	-
3c	$\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}$	0,013	1,123	-
3d	$\sum_k X_k G_{kc,ac}$	0,049	1,16E-02	-
3e	$3a \left(3b - \frac{3c}{3d} \right)$	0,051	0,015	-
3f	Jumlah 3e	0,067		
		a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻	-
4a	$\sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}}$	-0,001	-0,083	-
4b	$\tau_{ma,ca}$	80,973	28,874	-
4c	$\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}$	0,8	0,701	-
4d	$\sum_k X_k G_{ka,ca}$	0,1	0,044	-
4e	$4a \left(4b - \frac{4c}{4d} \right)$	-0,057	-1,068	-
4f	Jumlah 4e	-1,125		
5	$\ln \gamma_{H_2O}^{lc} = 1c + 2f + 3f + 4f$	-0,511		
6	$\ln \gamma_{H_2O}^{PHD} = \ln \gamma_{H_2O}^{Born} = 0$	0,000		
7	γ_{H_2O}	0,600		
8	P_{H_2O}	773,67		



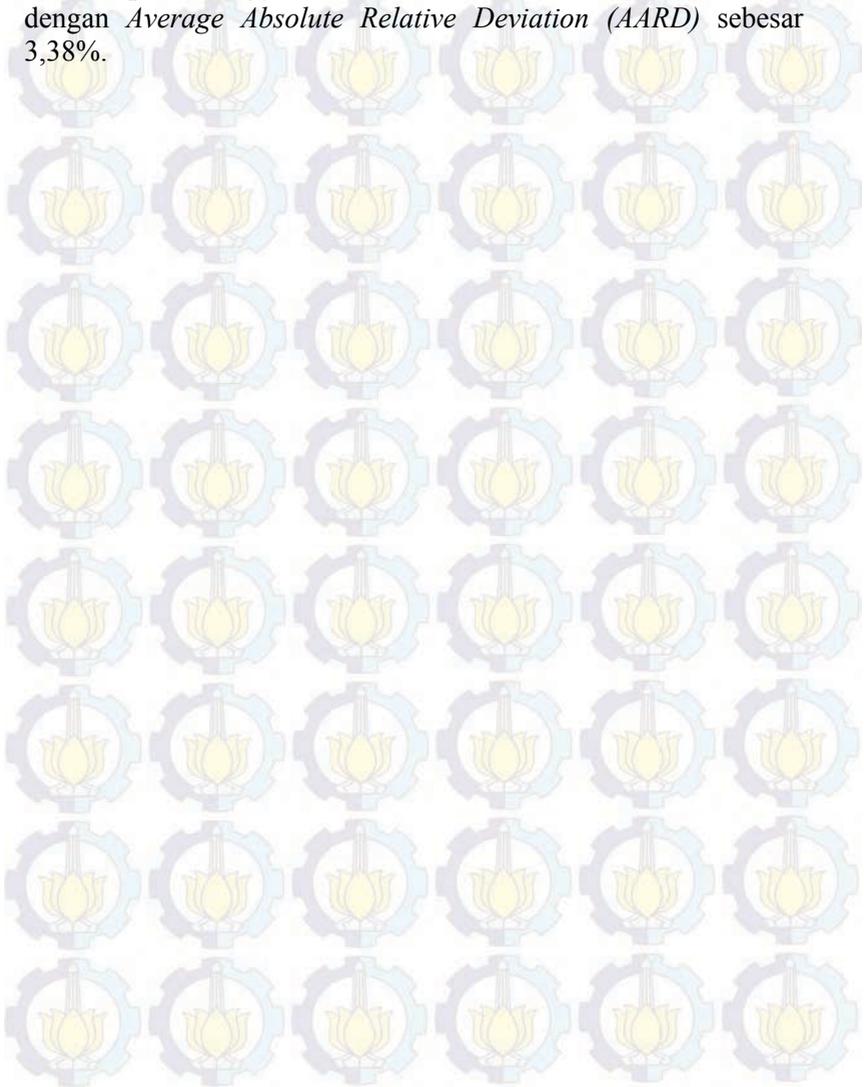
**EKSPERIMEN DAN ESTIMASI PARAMETER
KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR SISTEM
LARUTAN ELEKTROLIT CO₂-K₂CO₃-
(PIPERAZINE+DEA)-H₂O**

Nama Mahasiswa : 1) Vito Naufal Priyo (2311100133)
2) Bagus Arif Wisnuaji (2311100146)
Jurusan : Teknik Kimia, FTI-ITS
Dosen Pembimbing : Dr. Ir. Kuswandi, DEA
Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng

ABSTRAK

Proses absorpsi gas CO₂ dengan menggunakan larutan K₂CO₃ dan promotor seperti DEA dan Piperazine sangat luas dipakai di industri kimia. Data kesetimbangan fase uap-cair sistem CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O dibutuhkan untuk perancangan yang rasional dan optimal dari unit CO₂ *removal*. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan fasa uap-cair CO₂ didalam larutan K₂CO₃ dengan promotor campuran Piperazine+DEA dengan komposisi 30% K₂CO₃, variasi PZ-DEA dengan total 5% berat, dan variasi konsentrasi umpan CO₂ 5-20% pada temperatur 30-50°C. Solubilitas gas tidak dapat diukur secara langsung dalam sistem ini, karena akan terjadi reaksi antara pelarut dan gas CO₂. Metode analogi N₂O digunakan untuk mengestimasi semua properti CO₂ terhadap sistem CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O. Hasil dari eksperimen menunjukkan bahwa harga konstanta Henry yang meningkat seiring dengan kenaikan suhu yakni 3179,23-4410,41 kPa.m³/kmol. Pada konsentrasi CO₂ umpan dan promotor yang sama, kenaikan suhu operasi dapat menaikkan tekanan parsial gas CO₂ dalam larutan K₂CO₃ 30% dengan promotor PZ-DEA yakni sebesar 517,34-1462,30 Pa. Meningkatnya konsentrasi CO₂ dalam gas umpan dapat meningkatkan besarnya CO₂ *loading* rata-rata

sebesar 11,81% untuk 10% CO₂ umpan dan 36,43% untuk 20% CO₂ umpan. Penggunaan model E-NRTL memberikan hasil dengan *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* sebesar 3,38%.



**EXPERIMENT AND PARAMETER ESTIMATION OF
VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA FOR ELECTROLYTE
SOLUTION OF CO₂-K₂CO₃- (PIPERAZINE+DEA)-H₂O**

Student's Name : 1) Vito Naufal Priyo (2311100133)
2) Bagus Arif Wisnuaji (2311100146)

Department : Chemical Engineering, FTI-ITS

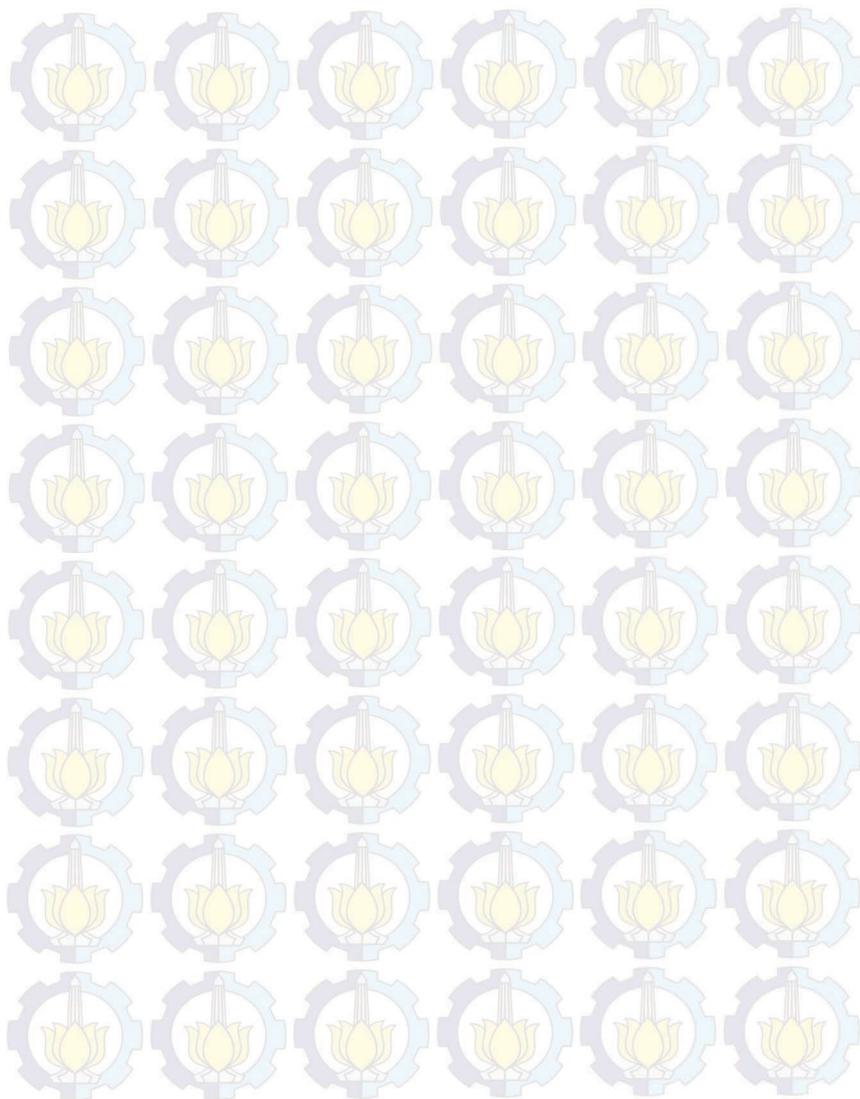
Advisors : Dr. Ir. Kuswandi, DEA
Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng

ABSTRACT

The process of absorption of CO₂ by chemical reactions taking K₂CO₃ (potassium carbonate) solution and activator materials such as DEA and Piperazine is widely used in the chemical industry. Data of equilibria vapor-liquid phase CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O system needed for a rational and optimum design of CO₂ removal unit. This study aims to determine the solubility of CO₂ in the experimental solution of K₂CO₃ with a mixture promoter Piperazine+DEA mixture with a composition of 30 % K₂CO₃, variation of total 5% PZ-DEA, and variation of CO₂ concentration in feed 5-20% at a temperature of 30-50°C. Gas solubility cannot be measured directly in this system, because there will be a reaction between the solvent and gas. N₂O analogy method is used to estimate all the properties of CO₂ in CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O system.

The results of this experiment show that the higher the temperature, the higher the value of Henry constant about 3179,23-4410,41 kPa.m³/kmol. At the same CO₂ feed and promotor, increasing the temperature makes partial pressure of CO₂ increase at 517,34-1462,30 Pa. The increasing of CO₂ concentration in feed can increase the amount of CO₂ loading with the average of 11,81% for 10% CO₂ and 36,43% for 20% CO₂. Using E-NRTL model gives a result with Average Absolute

Relative Deviation (AARD) about 3,38%.



KATA PENGANTAR

Segala puji dan syukur atas kehadiran Tuhan YME karena berkat Rahmat dan karunia-Nya yang telah memberi segala kemudahan dan kekuatan kepada penulis, sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan Tugas Akhir Skripsi yang berjudul "EKSPERIMEN DAN ESTIMASI PARAMETER KESETIMBANGAN FASA UAP-CAIR SISTEM LARUTAN ELEKTROLIT $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(PIPERAZINE+DEA)-H}_2\text{O}$ " yang merupakan salah satu syarat kelulusan bagi mahasiswa Teknik Kimia FTI-ITS Surabaya.

Keberhasilan penulisan Tugas Akhir Skripsi ini tidak lepas dari dorongan dan bimbingan dari berbagai pihak. Untuk itu dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih yang setulus-tulusnya kepada :

1. Bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA selaku Dosen Pembimbing Tugas Akhir Skripsi atas bimbingan dan saran yang telah diberikan.
2. Bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. selaku Dosen Pembimbing Tugas Akhir Skripsi dan Kepala Laboratorium Termodinamika.
3. Bapak dan Ibu Dosen Penguji atas saran yang telah diberikan.
4. Bapak Prof. Dr. Ir. Tri Widjaja, M.Eng., selaku Ketua Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember.
5. Bapak dan Ibu Dosen pengajar serta seluruh karyawan Jurusan Teknik Kimia.
6. Orang Tua dan keluarga kami yang telah banyak memberikan dukungan baik moral maupun spiritual.
7. Teman-teman seperjuangan di Laboratorium Termodinamika Teknik Kimia yang mengagumkan, terima kasih untuk segala support, bantuan dan kerjasamanya.
8. Teman-teman angkatan 2011 yang telah memberikan banyak support dan bantuan.

Semua pihak yang telah membantu penyelesaian Tugas Akhir Skripsi ini yang tidak dapat disebutkan satu persatu. Semoga segala kebaikan dan keikhlasan yang telah diberikan mendapat balasan dari Tuhan YME. Penulis mengharapkan saran dan kritik yang bersifat membangun demi kesempurnaan dan untuk penelitian di masa yang akan datang.

Akhirnya, semoga tugas akhir ini dapat memberikan kontribusi yang bermanfaat bagi Penulis dan Pembaca khususnya.

Surabaya, Juli 2015
Penyusun

DAFTAR ISI

Halaman Judul	i
Lembar Pengesahan	iii
Abstrak	iv
Abstract	vi
Kata Pengantar	viii
Daftar Isi	x
Daftar Gambar	xii
Daftar Tabel	xiv
BAB I PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	5
1.3 Tujuan Penelitian	6
1.4 Manfaat Penelitian	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Metode Absorpsi	7
2.2 Kesetimbangan Fase Uap-Cair	8
2.3 Solubilitas Fisik	10
2.4 Kesetimbangan Reaksi Kimia	12
2.5 Model Elektrolit Non Random Two Liquid (E-NRTL)	14
2.6 Parameter Interaksi Pada Model ENRTL	23
2.7 Metode GRG (<i>Generalized Reduced Gradient</i>) Non Linear	24
BAB III METODOLOGI PENELITIAN	
3.1 Deskripsi Penelitian	27
3.2 Peralatan Percobaan	28
3.3 Bahan Percobaan	29
3.4 Variabel Percobaan	29
3.5 Pelaksanaan Percobaan	29
3.6 Evaluasi Data	33

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	
4.1 Validasi Peralatan Penelitian	37
4.2 Hasil Eksperimen dan Pembahasan	38
4.3 Korelasi dengan Model E-NRTL	44
BAB V KESIMPULAN	51
DAFTAR PUSTAKA	53
DAFTAR NOTASI	57
APENDIKS	59
LAMPIRAN	109

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1	Hasil Validasi Peralatan Penelitian	37
Tabel 4.2	Hasil Perhitungan CO ₂ Terabsorp	41
Tabel 4.3	Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk 0-5% PZ-DEA	45
Tabel 4.4	Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk 1-4% PZ-DEA	46
Tabel 4.5	Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk 2-3% PZ-DEA	46
Tabel 4.6	Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO ₂ untuk 3-2% PZ-DEA	47
Tabel A.1	Perhitungan Massa Tiap Komponen Untuk 1% Massa PZ dan 4% Massa DEA	59
Tabel A.2	Perhitungan Mol N ₂ O Terabsorb %PZ dan %DEA	60
Tabel A.3	Perhitungan Mol H _{N2O} dan H _{CO2} Untuk %PZ dan %DEA	63
Tabel A.4	Nilai Konstanta C pada Persamaan Keseimbangan	66
Tabel A.5	Hasil Perhitungan Konstanta Keseimbangan Pada Analisa Awal Untuk 5% Mol CO ₂ pada suhu 40°C	67
Tabel A.6	Nilai Konstanta C pada Persamaan Keseimbangan	69
Tabel A.7	Hasil Perhitungan Konstanta Keseimbangan Pada Analisa Akhir Untuk 5% Mol CO ₂ pada suhu 40°C	70
Tabel A.8	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi di Liquid Untuk 5% Mol CO ₂ pada suhu 40°C	75
Tabel A.9	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas CO ₂ 5%	76

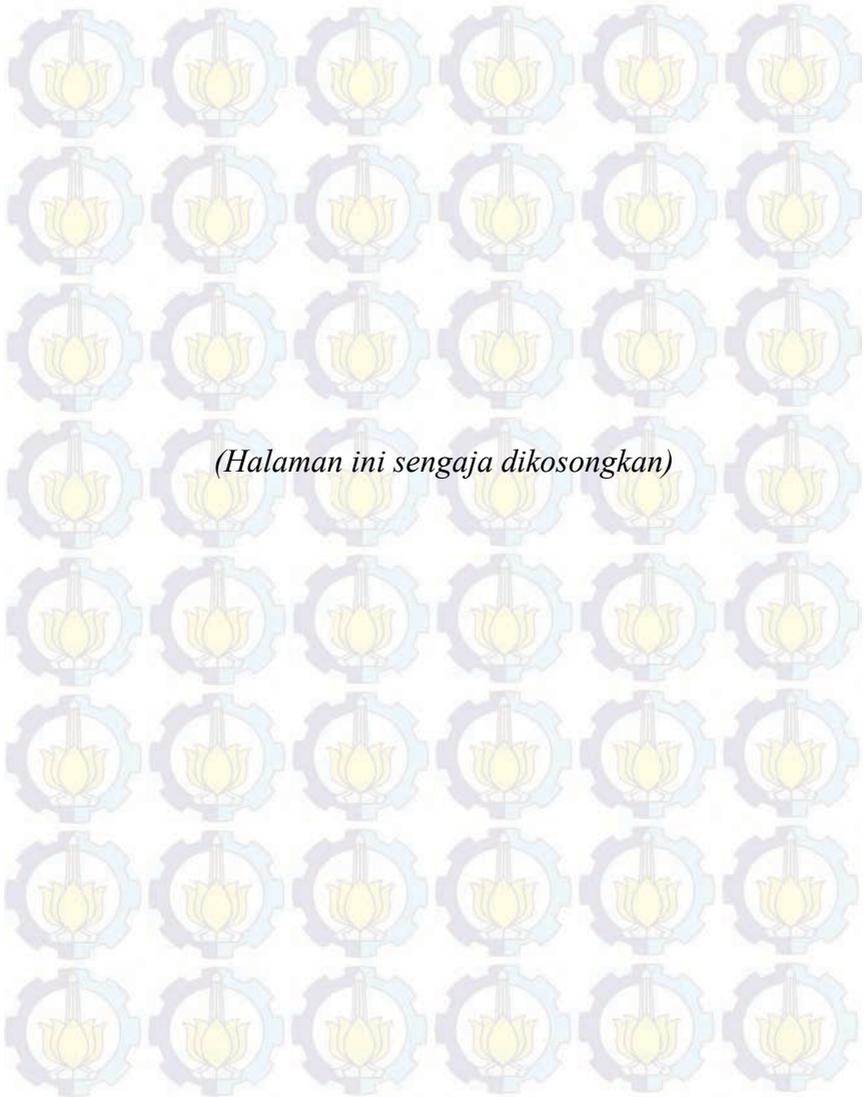
Tabel A.10	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas CO ₂ 5%	77
Tabel A.11	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas CO ₂ 5%	77
Tabel A.12	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas CO ₂ 5%	78
Tabel A.13	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas CO ₂ 10%	78
Tabel A.14	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas CO ₂ 10%	79
Tabel A.15	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas CO ₂ 10%	79
Tabel A.16	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas CO ₂ 10%	80
Tabel A.17	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas CO ₂ 20%	80
Tabel A.18	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas CO ₂ 20%	81
Tabel A.19	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas CO ₂ 20%	81
Tabel A.20	Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas CO ₂ 20%	82
Tabel A.21	Hasil Perhitungan C _i Untuk 1% PZ 4% DEA	83
Tabel A.22	Data Nonrandomness Parameter	84

Tabel A.23	Data Konstanta Binary Interaction Parameter antar Molekul-Pasangan ion dan Pasangan Ion-Molekul untuk Sistem PZ-DEA	85
Tabel A.24	Perhitungan Binary Interaction Parameter (Molekul:CO ₂)	93
Tabel A.25	Perhitungan Binary Interaction Parameter (Molekul:H ₂ O)	94
Tabel A.26	Perhitungan Binary Interaction Parameter (Molekul:DEA)	95
Tabel A.27	Perhitungan Binary Interaction Parameter (Molekul:PZ)	96
Tabel A.28	Data Konstanta Binary Interaction Parameter antar Molekul	97
Tabel A.29	Perhitungan Binary Interaction Parameter antar Molekul	99
Tabel A.30	Perhitungan Koefisien Aktivitas H ₂ O	106



DAFTAR GAMBAR

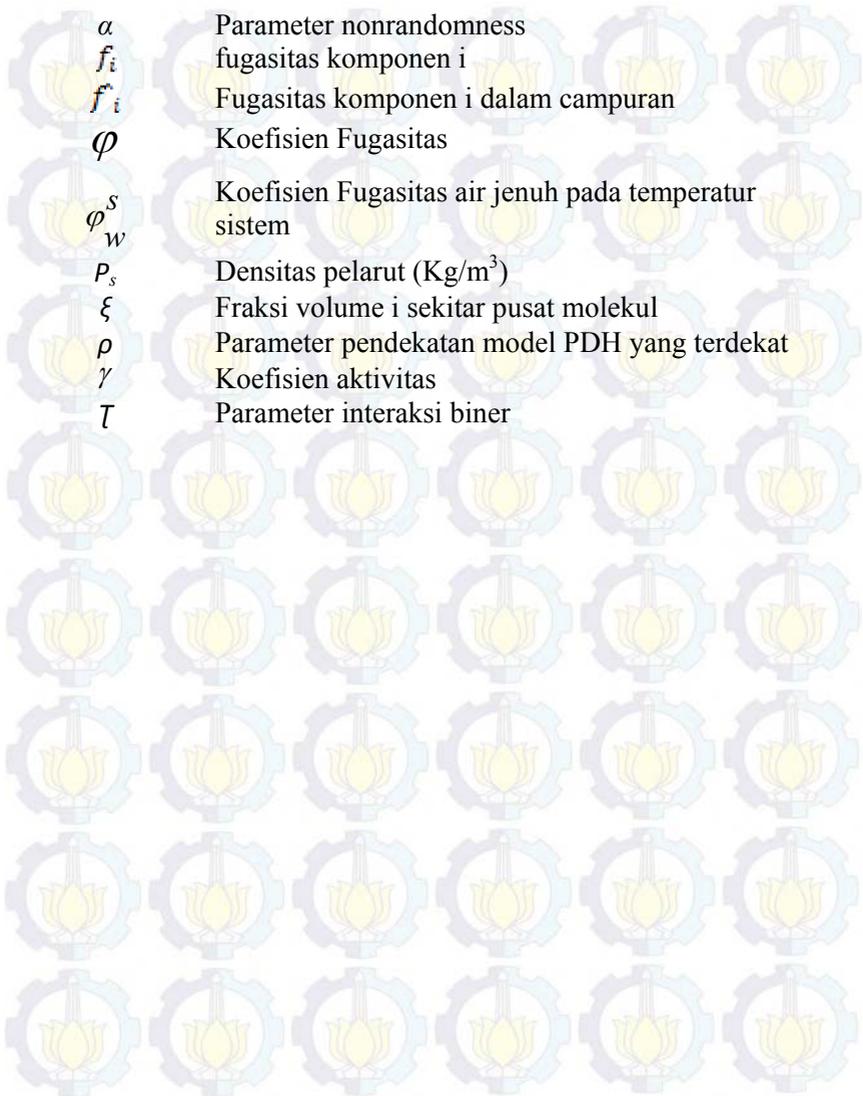
Gambar 3.1	Skema Peralatan Solubilitas CO ₂	28
Gambar 3.2	Diagram Alir Metodologi Penelitian	31
Gambar 3.3	Diagram Alir Perhitungan Parameter dengan Persamaan E-NRTL	32
Gambar 4.1	Hasil Validasi Peralatan Eksperimen	38
Gambar 4.2	Solubilitas CO ₂ pada 30% K ₂ CO ₃ dengan Promotor PZ-DEA	39
Gambar 4.3	Pengaruh Suhu terhadap CO ₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 5% CO ₂	42
Gambar 4.4	Pengaruh Suhu terhadap CO ₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 10% CO ₂	42
Gambar 4.5	Pengaruh Suhu terhadap CO ₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 5% CO ₂	43
Gambar 4.6	Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading Promotor 0-5% PZ-DEA	48
Gambar 4.7	Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading Promotor 1-4% PZ-DEA	48
Gambar 4.8	Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading Promotor 2-3% PZ-DEA	49
Gambar 4.9	Hubungan Tekanan Parsial CO ₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO ₂ Loading Promotor 3-2% PZ-DEA	49



DAFTAR NOTASI

A_{φ}	Parameter Debye-Huckel
C	Konsentrasi (mol/L)
D_i	Konstanta Dielektrik spesies i
D_s	Konstanta Dielektrik pelarut
D_m	Konstanta Dielektrik campuran pelarut
D_w	Konstanta Dielektrik air
e	Muatan elektron
G	Energi Gibbs
G^{ex}	Energi Gibbs ekkses
G^{id}	Energi Gibbs ideal
ΔG^0	Perubahan energi Gibbs
H_{CO_2}	Konstanta Henry CO_2 di larutan
$H^o_{CO_2}$	Konstanta Henry CO_2 di air
H_{N_2O}	Konstanta Henry N_2O di larutan
$H^o_{N_2O}$	Konstanta Henry N_2O di air
ΔH^0	Perubahan entalpy reaksi standard
I_x	Daya ionik
k	Konstanta Boltzmann
K	Konstanta kesetimbangan
N_o	Bilangan Avogadro
P^s_w	Tekanan uap air (Pa)
P	Tekanan total (Pa)
p	Tekanan parsial (Pa)
R	Konstanta gas ideal ($J.K^{-1}.mol^{-1}$)
T	Temperatur (K)
$\bar{v}_{m,w}^{-\infty}$	Parsial molar volume <i>solute</i> m (m^3)
v_w^l	Parsial molar volume untuk air murni (m^3)
V	Volume (m^3)
x	Fraksi komponen di liquid
y	Fraksi komponen di vapor
z	Muatan ion

Huruf Latin



α	Parameter nonrandomness
f_i	fugasitas komponen i
f_i^s	Fugasitas komponen i dalam campuran
ϕ	Koefisien Fugasitas
ϕ_w^s	Koefisien Fugasitas air jenuh pada temperatur sistem
ρ_s	Densitas pelarut (Kg/m ³)
ξ	Fraksi volume i sekitar pusat molekul
ρ	Parameter pendekatan model PDH yang terdekat
γ	Koefisien aktivitas
τ	Parameter interaksi biner

BIODATA PENULIS



VITO NAUFAL PRIYO adalah anak pertama dari dua bersaudara pasangan Bapak Yuswanto dan Ibu Evie. Penulis dilahirkan di Jakarta pada tanggal 15 November 1993. Jenjang pendidikan yang ditempuh dimulai dari TK Islam Pondok Duta, SD Islam Pondok Duta, SMPN 103 Jakarta, dan SMAN 39 Jakarta. Selepas lulus SMA, penulis melanjutkan kuliah tahap sarjana di Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS)

Surabaya dan tergabung dalam angkatan 2011 (K-51). Penulis menunjukkan kegigihan dalam menempuh perkuliahan dengan semangat tinggi dan pantang menyerah. Selain aktif sebagai mahasiswa, penulis juga aktif dalam berbagai organisasi kemahasiswaan yaitu sebagai staff Competency Development Departement HIMATEKK FTI-ITS dan staff Chemical Engineering Photography (CEPOT). Dalam kegiatan akademis, penulis pernah kerja praktik di Total E&P Indonesia Balikpapan. Pada tahun terakhir perkuliahan, penulis memilih Laboratorium Termodinamika sebagai laboratorium yang menjadi spesialisasinya. Penulis menyelesaikan tugas akhir “Pra Desain Pabrik *Liquefied Natural Gas* (LNG) dari *Coal Bed Methane*” pada semester 7 dan skripsi pada semester 8 dengan judul “Eksperimen dan Estimasi Parameter Kesetimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Elektrolit $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(Piperazine+DEA)-H}_2\text{O}$ ” dengan Dosen Pembimbing Dr. Ir. Kuswandi, DEA dan Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. Penulis menerima kritik dan saran yang dapat dikirimkan lewat email: vitonaufal@gmail.com.



(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BIODATA PENULIS



Bagus Arif Wisnuaji, lahir di Denpasar pada tanggal 22 Agustus 1993, merupakan anak pertama dari pasangan bapak Bagus Nyoman Putra dan Ibu Diah Sintawati. Penulis memulai pendidikan di SD Cipta Dharma Denpasar, kemudian melanjutkan sekolah ke SMP Negeri 1 Denpasar dan SMA Negeri 4 Denpasar. Setelah lulus SMA, penulis melanjutkan kuliah tahap sarjana di Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS) Surabaya, dan tergabung dalam angkatan 2011 (K-51). Semasa kuliah, penulis juga aktif dalam kegiatan organisasi kemahasiswaan seperti staff Social Development (SOSDEV) HIMATEKK FTI-ITS dan Ketua Teknik Kimia Basketball Club (TBC). Dalam kegiatan akademis, penulis pernah kerja praktik di Total E&P Indonesia, Balikpapan pada bulan Juli-Agustus 2014. Memasuki tahun terakhir diawali dengan bergabung sebagai anggota Laboratorium Thermodinamika Teknik Kimia ITS. Penulis menyelesaikan “Pra Desain Pabrik Liquefied Natural Gas (LNG) dari Coal Bed Methane” pada semester 7 dan skripsi pada semester 8 dengan judul “Eksperimen dan Estimasi Parameter Kesetimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Elektrolit $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-(Piperazine+DEA)}$ ” dengan Dosen Pembimbing bapak Dr. Ir. Kuswandi, DEA dan bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng. Penulis sangat terbuka dalam menerima kritik dan saran, silakan menghubungi penulis lewat email: arif.bagus7@gmail.com



(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Indonesia merupakan salah satu negara penghasil gas alam papan atas di dunia. Data BP Statistics tahun 2014 menunjukkan cadangan gas alam terbukti Indonesia mencapai 103,3 TCF. Dengan angka cadangan tersebut menempatkan Indonesia berada pada posisi ke-14 pemilik cadangan terbesar di dunia. Bahkan, di kawasan Asia, Indonesia merupakan pemilik cadangan gas terbesar kedua setelah China yang memiliki 115,6 TCF. Kendati memiliki cadangan gas yang cukup besar, namun gas alam belum digunakan secara maksimal di Indonesia. Sebagian besar gas alam tersebut dijual ke pasar ekspor. Untuk konsumsi domestik, proporsi pemakaian gas alam hanya mencakup 17% dari total kebutuhan energi Indonesia. Mengacu pada tingkat produksi sekarang, cadangan gas alam Indonesia bisa bertahan untuk jangka waktu 50 tahun. Dengan tingkat cadangan yang masih melimpah dan berharga jauh lebih murah ketimbang bahan bakar minyak (BBM), salah satu solusi yang ditawarkan oleh pemerintah adalah menerapkan kebijakan konversi BBM ke gas secara masif. Langkah ini diperkirakan akan berdampak signifikan bagi pengurangan subsidi BBM yang selama ini selalu membebani anggaran negara (Dudley, 2014).

Kualitas gas alam penting untuk diperhatikan, gas alam mengandung kontaminan berupa H_2O , N_2 , Hg, CO_2 dan H_2S . Dalam hal ini, penghilangan kontaminan atau pemurnian gas alam memiliki peranan penting dalam penentuan harga produksi gas alam yang dihasilkan, sehingga dibutuhkan teknologi pemurnian gas alam yang efisien dan ekonomis. Permasalahan utama adalah kandungan CO_2 , dikarenakan CO_2 termasuk kategori gas yang bersifat asam (*acid gas*). Adanya gas CO_2 dapat menyebabkan korosi pada utilitas pabrik dan sistem perpipaannya, dikarenakan CO_2 dan uap air dalam gas alam akan

menghasilkan senyawa *Carbonic Acid* (H_2CO_3) yang sangat korosif. Disamping itu gas CO_2 dapat mengurangi nilai kalor dari gas alam, yang akan menyebabkan penurunan harga produk gas alam. Pada kilang LNG, gas CO_2 harus dihilangkan untuk mencegah pembekuan atau pembuntuan sewaktu proses pendinginan. Dalam pabrik sintesa ammonia, CO_2 harus dipisahkan dari gas proses untuk menghindari keracunan promotor sintesa ammonia. Namun demikian, gas CO_2 yang telah dipisahkan tersebut diupayakan untuk ditangkap agar dapat dimanfaatkan dan mengurangi penumpukan Gas Rumah Kaca di atmosfer yang menyebabkan pemanasan global. Namun hanya sebagian kecil saja CO_2 yang dimanfaatkan, diantaranya adalah sebagai bahan baku pembuatan urea, industri minuman berkarbonat (minuman ringan), industri logam dan karoseri sebagai pendingin pada pengelasan logam (*welding*) dan pengecoran, industri makanan sebagai media pengawetan sayuran, buah-buahan, gabah, daging dan lain-lain (*Suprpto*, 2007).

Berbagai teknologi pemisahan CO_2 secara luas telah banyak dikembangkan, diantaranya yaitu metode membran, kriogenik, adsorpsi, dan yang paling umum digunakan adalah metode absorpsi dengan larutan kimia. Membran merupakan metode pemisahan dengan menggunakan sistem semacam selaput/membran, dimana *feed* dilewatkan melalui membran tersebut. Membran merupakan filter yang sangat spesifik, dimana hanya molekul dengan ukuran tertentu saja yang dapat melewati membran, sedangkan sisanya akan tertahan di permukaan membran. Pada proses pemisahan ini tidak memerlukan zat kimia tambahan, tidak ada limbah buangan *by-product* yang dihasilkan, serta memerlukan tekanan operasi yang rendah dan umumnya bisa beroperasi pada suhu lingkungan. Namun kelemahan dari proses pemisahan ini yaitu terkadang perlu dilakukan *pretreatment feed* terlebih dahulu untuk mendapatkan *feed* yang murni. Hal ini dikarenakan membran rentan terdegradasi oleh *impurities*. Sementara kriogenik dapat dipakai untuk tekanan

parsial CO_2 yang besar, namun dengan adanya proses pendinginan, biaya yang dikeluarkan tidak sedikit. Bila digunakan untuk kandungan gas CO_2 yang rendah metode ini tidak efektif dari segi ekonomi, metode ini biasanya hanya digunakan pada aliran gas dengan kandungan CO_2 yang sangat besar. Sedangkan adsorpsi merupakan metode pemisahan CO_2 dengan menggunakan suatu adsorben yang dapat menyerap CO_2 . Proses adsorpsi telah diterapkan namun kapasitas dan selektivitas yang rendah tidak berpotensi untuk pengambilan CO_2 dari aliran gas dengan baik. Apabila adsorben sudah mulai jenuh, regenerasi secara menyeluruh dan pembersihan perlu dilakukan sebelum adsorben digunakan kembali (*Suprpto, 2007*)

Metode absorpsi adalah metode pemisahan CO_2 dari aliran gas yang paling ekonomis. Absorpsi CO_2 dengan larutan kimia atau fisika adalah teknologi yang dikembangkan dengan baik dan telah diaplikasikan pada berbagai proses komersial, termasuk pemurnian gas dan produksi ammonia. Banyak penelitian telah dilakukan pada teknologi ini lebih dari 50 tahun yang lalu, terutama pada pengembangan pengetahuan terhadap spesifikasi dan karakteristik dari jenis pelarut. Sebagai contoh yang telah banyak dipublikasikan yaitu jenis pelarut seperti *amine*. Sedangkan pengembangan pengetahuan mengenai campuran pelarut yang kompleks masih sedikit dilakukan, di mana teknologi ini merupakan teknologi yang paling efektif. Salah satu proses absorpsi/stripping yang banyak dipakai dan dikembangkan adalah dengan sirkulasi larutan kimia. Proses semacam ini banyak dipakai pada produksi ammonia dan pemurnian gas alam. Sedangkan untuk proses absorpsi fisika biasanya diaplikasikan pada tekanan yang tinggi. Beberapa pelarut yang umum digunakan yaitu Selexol, Rectisol, dan Purisol. Karena pelarut fisika tidak bereaksi dengan CO_2 , maka pelarut tidak dikonsumsi (tidak berkurang). Sebagai tambahan, panas absorpsi dibatasi pada *enthalpy* absorpsi fisika, yang mana nilainya jauh lebih rendah dibandingkan dengan menggunakan pelarut yang reaktif.

Proses dibatasi oleh selektivitas dan laju absorpsi yang rendah (<http://www.owl.net.rice.edu/~ceng403/co2abs.html>).

Beberapa penelitian terdahulu telah dilakukan, dimulai dari Kuswandi *et al* (2008) yang melakukan penelitian mengenai data solubilitas gas CO₂ dalam larutan Potassium Carbonat (K₂CO₃) untuk meningkatkan kinerja proses absorpsi. Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan *wetted wall column* sebagai absorber dari berbagai konsentrasi Potassium Carbonat yaitu 10, 15, 20, 25 dan 30% massa dan suhu operasi 30, 40, 50 dan 60 °C. Perhitungan estimasi menggunakan persamaan *vapour liquid equilibrium* (VLE) dan reaksi kimia dengan metode NRTL. Hasil penelitian menunjukkan penurunan jumlah mol CO₂ yang terlarut dengan naiknya suhu serta konsentrasi larutan Potassium Carbonat.

Hilliard (2008), memprediksi model termodinamika untuk larutan campuran K₂CO₃, Piperazine, dan MEA untuk mengabsorpsi CO₂. Percobaan dilakukan pada suhu 40° C dan 60° C dan campuran K₂CO₃, Piperazine, dan MEA yang bervariasi. Dari hasil percobaan didapatkan campuran 2,5 m K⁺ +7 m MEA+ 2 m PZ memiliki kapasitas diferensial tertinggi yaitu 0,17.

Winarno *et al* (2008), melakukan penelitian mengenai proses absorpsi disertai reaksi kimia gas CO₂ memakai larutan K₂CO₃ dengan promotor Diethanolamine (DEA). Penelitian ini bertujuan untuk menentukan data kesetimbangan fasa uap-cair sistem larutan elektrolit CO₂-K₂CO₃-Diethanolamine-H₂O memakai kolom absorpsi tipe *wetted wall column* (WWC) pada tekanan atmosfer. Penelitian dilakukan dengan konsentrasi larutan K₂CO₃ 30% dan DEA 2% dengan variabel suhu 30°C, 50°C, dan 70°C dan gas umpan CO₂ antara 1-7%. Hasil eksperimen menunjukkan bahwa kenaikan konsentrasi CO₂ dalam gas umpan pada temperatur konstan akan menyebabkan kenaikan CO₂ loading, penurunan kadar CO₃²⁻, kenaikan kadar HCO₃⁻, kenaikan kadar CO₂ dalam larutan, kenaikan tekanan parsial kesetimbangan CO₂ dan penurunan tekanan parsial kesetimbangan H₂O. Hasil

eksperimen juga dikorelasikan dengan model *Electrolyte Non-Random Two Liquid* (ENRTL) dengan deviasi absolut 3,5%.

Thee et al (2012), melakukan penelitian mengenai evaluasi reaksi kinetik absorpsi CO₂ kedalam larutan K₂CO₃ dengan promotor *monoethanolamine* (MEA) dibawah kondisi seperti yang terjadi pada industri CO₂ *capture plant*. Hasil yang ditunjukkan disini memperlihatkan bahwa pada 63°C, penambahan MEA pada jumlah kecil 1,1 M (5% berat) mempercepat laju *overall* absorpsi CO₂ pada 30% berat pelarut K₂CO₃ dengan faktor 16 dan pada penambahan MEA 2,2 M (10% berat) mempercepat laju *overall* absorpsi CO₂ pada 30% berat pelarut K₂CO₃ dengan faktor 45.

Altway et al (2014), melakukan prediksi dengan pelarut K₂CO₃-MDEA-H₂O, didapatkan bahwa dengan penambahan jumlah MDEA dapat meningkatkan besarnya loading dari CO₂ dan dapat menurunkan tekanan parsial CO₂ dalam gas keluaran.

Kurniati et al (2014), dengan adanya MDEA (1%) dan DEA (0-3%) dalam larutan K₂CO₃ dapat meningkatkan konstanta Henry sehingga dengan kata lain MDEA-DEA dapat menurunkan kelarutan CO₂ dalam larutan.

Zulfetra dan Nuharani (2014), melakukan penelitian dengan pelarut K₂CO₃-MDEA-DEA dan K₂CO₃-PZ-DEA, didapatkan hasil pelarut K₂CO₃-PZ-DEA dapat mengabsorpsi gas CO₂ komposisi 20% lebih baik dibandingkan dengan pelarut K₂CO₃-MDEA-DEA. Hal ini dikarenakan pelarut K₂CO₃-PZ-DEA memiliki nilai tekanan parsial lebih kecil dibandingkan pelarut K₂CO₃-MDEA-DEA.

1.2 Perumusan Masalah

Penelitian-penelitian mengindikasikan bahwa *potassium carbonate* (K₂CO₃) mempunyai panas regenerasi yang rendah tetapi laju reaksinya lambat bila dibandingkan dengan *amine*. Beberapa penelitian telah menunjukkan bahwa penambahan promotor *amine* dapat mempercepat proses absorpsi. Adapun salah satu contoh penelitian terdahulu adalah dengan penambahan

promotor PZ (Piperazine) dan promotor DEA (*Diethanolamine*) pada larutan K_2CO_3 kemudian dikorelasikan dengan model E-NRTL. Tetapi kelemahan dari DEA yaitu produk degradasinya bersifat korosif dan juga *foaming* larutan sering terjadi pada konsentrasi DEA yang tinggi. Sedangkan kelemahan PZ adalah panas reaksinya tinggi dan harganya mahal.

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan fasa uap-cair CO_2 dalam larutan K_2CO_3 dengan promotor campuran Piperazine-DEA dalam berbagai konsentrasi *solvent*, konsentrasi gas umpan CO_2 dan suhu pada tekanan atmosferik.

1.4 Manfaat Penelitian

Data kesetimbangan fasa uap-cair CO_2 di dalam larutan K_2CO_3 dengan penambahan promotor campuran Piperazine-DEA dapat dijadikan sebagai acuan pada perancangan kolom absorpsi untuk proses mereduksi gas CO_2 pada dunia industri.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Metode Absorpsi

Absorpsi adalah suatu proses pemisahan suatu komponen fluida dari campurannya dengan menggunakan solvent atau fluida lain. Cairan yang digunakan juga umumnya tidak mudah menguap dan larut dalam gas. Sebagai contoh yang umum dipakai adalah absorpsi amonia dari campuran udara-amonia oleh air. Setelah absorpsi terjadi, campuran gas akan di-recovery dengan cara distilasi.

Terdapat beberapa hal lain yang perlu dipertimbangkan dalam pemilihan solvent, yaitu:

1. Kelarutan Gas

Kelarutan gas harus tinggi, sehingga menaikkan rate absorpsi dan mengurangi jumlah solvent yang dibutuhkan. Umumnya suatu solvent yang memiliki sifat kimia hampir sama dengan solute yang diabsorpsi akan memberikan kelarutan yang baik. Reaksi kimia antara solvent dan solute akan terjadi pada kelarutan gas yang sangat tinggi.

2. Volatilitas

Pelarut atau solvent harus memiliki tekanan uap yang rendah dimana gas saat meninggalkan suatu proses absorpsi biasanya saturated dengan solvent dan mungkin banyak yang mungkin hilang.

3. Korosivitas

Pelarut hendaknya memiliki korosivitas kecil, sehingga material konstruksi alat tidak terlalu mahal.

4. Harga pelarut harus murah, dan mudah untuk didapat.

5. Viskositas

Pelarut harus mempunyai harga viskositas yang rendah sehingga proses absorpsi berjalan cepat, pressure drop kecil pada saat pemompaan, memberikan sifat perpindahan panas

yang baik dan meningkatkan karakteristik flooding dalam menara absorpsi.

- Hal-hal lain yang meliputi : solvent harus nontoxic, nonflammable, memiliki komposisi kimia yang stabil dan titik bekunya rendah.

2.2 Kestimbangan Fase Uap-Cair

Syarat terjadinya kesetimbangan fase pada sistem tertutup meliputi kesamaan suhu, tekanan, potensial kimia setiap komponen pada masing-masing fasa dan energi bebas Gibbs total mencapai minimum.

Potensial kimia suatu komponen ditransformasikan sebagai fugasitas komponen tersebut, yaitu :

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.1)$$

Lewis/Randal mendefinisikan fugasitas untuk larutan ideal adalah fungsi dari konsentrasi :

$$\hat{f}_i^{ideal} = x_i f_i \quad (2.2)$$

Dimana x_i adalah fraksi mol dari spesies i . Apabila larutan tidak ideal, maka faktor koreksi digunakan untuk menyatakan koefisien aktifitas γ sebagai koefisien aktivitas dari *liquid*.

$$\gamma_i = \frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^{ideal}} = \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i} \quad (2.3)$$

Kesetimbangan uap-cair direpresentasikan dalam fugasitas sebagai fungsi dari konsentrasi dan tekanan. Untuk spesies i dalam campuran uap:

$$\hat{f}_i^V = y_i \phi_i P \quad (2.4)$$

Untuk spesies i dalam larutan cair:

$$\hat{f}_i^L = x_i \gamma_i f_i \quad (2.5)$$

Pada kondisi kesetimbangan maka berlaku (formulasi gamma phi VLE):

$$y_i \hat{\phi}_i P = x_i \gamma_i f_i \quad (2.6)$$

Persamaan fugasitas spesies i murni adalah:

$$f_i = \phi_i^s P_i^s \exp\left(\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.7)$$

Faktor eksponensial tersebut dikenal sebagai faktor poynting.

Substitusi persamaan (2.7) ke (2.6) maka didapat:

$$y_i \hat{\phi}_i P = x_i \gamma_i \phi_i^s P_i^s \exp\left(\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.8)$$

atau

$$y_i \Phi_i P = x_i \gamma_i P_i^s \quad (2.9)$$

dimana:

$$\Phi_i = \frac{\phi_i}{\phi_i^s} \exp\left(-\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) \quad (2.10)$$

Pada tekanan rendah, persamaan VLE yang lebih realistis hanya menganggap fasa uap sebagai model gas ideal dimana:

$$\hat{\phi}_i = \hat{\phi}_i^s = 1 \quad \text{dan} \quad P = P_i^s \cong 0 \quad \text{atau faktor}$$

$$\exp\left(-\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT}\right) = 1$$

Sehingga harga $\Phi_i = 1$, atau persamaan (2.9) menjadi :

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^s \quad (2.11)$$

Kondisi kesetimbangan dinyatakan dengan energi Gibbs (G) yang dimiliki sistem tersebut, perubahan energi Gibbs yang terjadi untuk semua proses irreversibel dinyatakan :

$$dG^{Tot} \leq 0 \quad (2.12)$$

Diberikan tanda pertidaksamaan di atas adalah dalam sistem tertutup pada tekanan dan temperatur tetap, apabila perubahan properti terjadi maka energi Gibbs total akan menurun. Dengan kata lain energi Gibbs akan minimal pada kondisi kesetimbangan.

Energi Gibbs total memberikan kondisi umum suatu kesetimbangan. Untuk larutan, digunakan istilah energi Gibbs eksek yang merepresentasikan penyimpangan dari larutan ideal.

$$G_i^{ex} = G_i - G_i^{ideal} \quad (2.13)$$

Dimana G_i merupakan energi Gibbs molar untuk spesies i :

$$G_i = \Gamma(T) + RT \ln \hat{f}_i \quad (2.14)$$

$\Gamma(T)$ adalah konstanta integrasi.

Substitusi Persamaan (2.14) ke Persamaan (2.13) dan menggabungkan dengan aturan *Lewis/Randal* maka diperoleh :

$$G_i^{ex} = RT \ln \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i} = RT \ln \gamma_i \quad (2.15)$$

2.3 Solubilitas Fisik

Solubilitas fisik adalah kesetimbangan antara molekul CO_2 gas dan molekul CO_2 larutan aqueous *amine* :



Hal ini dapat dinyatakan dengan hukum Henry.

Hukum Henry ini dapat diterapkan untuk menghubungkan konsentrasi kesetimbangan gas dalam liquid sebagai fungsi

tekanan parsialnya dalam fase gas. Solubilitas memiliki berbagai definisi, tetapi definisi yang digunakan yaitu:

$$H_A = \frac{P_A}{C_A^*} \quad (2.16)$$

Dimana C_A^* konsentrasi kesetimbangan gas yang dapat dihitung dari mol gas total yang secara fisik terserap dalam volume liquid pengabsorb.

Dalam kesetimbangan gas-cair hukum Henry dinyatakan :

$$P_{CO_2} \phi_{CO_2} = H_{CO_2} \gamma_{CO_2}^* x_{CO_2} \quad (2.17)$$

Dimana P adalah tekanan sistem, y_{CO_2} adalah fraksi mol CO_2 dalam fase gas, ϕ_{CO_2} koefisien fugasitas dalam fase gas, H_{CO_2} konstanta hukum Henry CO_2 dalam solven campuran air dan amine, x_{CO_2} fraksi mol CO_2 kesetimbangan dalam fase liquid, dan $\gamma_{CO_2}^*$ koefisien aktivitas unsimetris CO_2 dalam campuran air dan amine.

Sebagai *reference state* digunakan pengenceran tak berhingga dalam air sehingga $\gamma_{CO_2}^* \rightarrow 1$, dan konstanta Henry untuk air murni adalah :

$$H_{CO_2}^w = \frac{P_{CO_2}}{x_{CO_2}} \quad (2.18)$$

Koefisien aktifitas dalam campuran *solvent* dinyatakan :

$$\gamma_{CO_2}^* = \frac{H_{CO_2}}{H_{CO_2}^w} \quad (2.19)$$

Konstanta Henry CO_2 dalam campuran *solvent* dicari dari data kelarutan CO_2 (eksperimen), sedangkan konstanta Henry CO_2 dalam air murni ditentukan dari persamaan korelasi sebagai berikut (*Austgen et al, 1991*) :

$$\ln H_{CO_2}^w = 170,7126 - 8477,711/T - 21,95743 \ln T + 0,005781T \quad (2.20)$$

konstanta Henry dalam satuan Paskal, T adalah temperatur sistem dalam Kelvin.

Pengukuran solubilitas CO₂ tidak dapat dilakukan langsung dalam pelarut amine, karena reaksi antara CO₂ dan amine mungkin dapat mempengaruhi keakuratan data. Umumnya, solubilitas CO₂ secara fisik ditentukan dengan menggunakan metode analogi N₂O sebagaimana yang dilakukan oleh Clarke (1964). Jadi setelah solubilitas N₂O didapatkan secara eksperimen, solubilitas N₂O dapat dihitung dengan :

$$\frac{H_{CO_2,amine}}{H_{N_2O,amine}} = \frac{H_{CO_2,water}}{H_{N_2O,water}} \quad (2.21)$$

Berdasarkan studi yang dilakukan oleh Versteeg dan Swaaij (1988), diperoleh dua persamaan untuk solubilitas CO₂ dan N₂O dalam air.

$$H_{N_2O,water} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (8.5470 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2284}{T}\right) \quad (2.22)$$

$$H_{CO_2,water} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (2.8249 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2044}{T}\right) \quad (2.23)$$

2.4 Kestimbangan Reaksi Kimia

Permasalahan dalam menentukan komposisi kesetimbangan pada sistem reaktif membutuhkan sebuah kondisi dan informasi spesifik mengenai komponen yang ada dalam sistem tertutup. Konstanta kesetimbangan untuk tiap-tiap reaksi dalam sistem tertutup diberikan oleh *Smith et al* (2001), yaitu :

$$K = \prod_i (x_i \gamma_i)^{v_i} = \exp\left(\frac{-\Delta G^o}{RT}\right) \quad (2.24)$$

Sedangkan hubungan ΔG° dan ΔH° diberikan oleh persamaan :

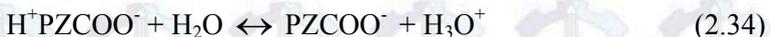
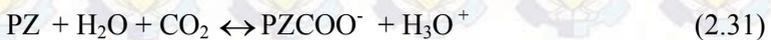
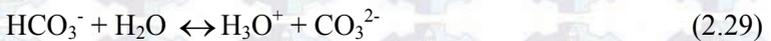
$$\Delta H^\circ = -RT^2 \frac{d(\Delta G^\circ / RT)}{dT} \quad (2.25)$$

ΔH° merupakan perubahan *enthalpy* reaksi standart.

Kombinasi Persamaan (2.24) dan Persamaan (2.25) :

$$\int d(\ln K) = \int \frac{\Delta H^\circ}{RT^2} dT \quad (2.26)$$

Di dalam sistem larutan $\text{CO}_2\text{-K}_2\text{CO}_3\text{-PZ-DEA-H}_2\text{O}$ terjadi kesetimbangan reaksi kimia sebagai berikut (Ma Xiaoguang, 2010) :





Pada larutan Potassium Karbonat encer, gas CO₂ bereaksi dengan prinsip mekanisme reaksi asam basa berpenyangga dengan senyawa *alkanolamine* dimana reaksi kesetimbangannya dapat dituliskan sebagai reaksi disosiasi kimia. Untuk molekular *solute* CO₂, kesetimbangan fisika diekspresikan oleh :

$$y_m \varphi_m P = x_m \gamma_m^* H_{m,w}^{(P_w^s)} \exp \frac{\bar{v}_{m,w}^\infty (P - P_w^s)}{RT} \quad (2.37)$$

Di mana $H_{m,w}^{(P_w^s)}$ adalah konstanta *Henry solute* dalam air pada temperatur sistem, φ_m koefisien fugasitas, P tekanan sistem, P_w^s tekanan uap pada air murni pada temperatur sistem T, dan $\bar{v}_{m,w}^\infty$ adalah parsial molar volume untuk molekular *solute* m pada pelarutan tak berhingga dalam air.

Untuk air, VLE diekspresikan oleh :

$$y_{\text{H}_2\text{O}} \varphi_{\text{H}_2\text{O}} P = x_{\text{H}_2\text{O}} \gamma_{\text{H}_2\text{O}}^s P_w^s \exp \frac{v_w^l (P - P_w^s)}{RT} \quad (2.38)$$

Di mana φ_w^s adalah koefisien fugasitas untuk air jenuh pada temperatur sistem dan v_w^l molar volume untuk air murni pada temperatur sistem.

Molar volume air murni dapat dicari dengan cara massa molekul relatif dari air murni dibagi dengan densitasnya, sedangkan tekanan uap *saturated* dari air murni diperoleh dari persamaan *Antoine*.

2.5 Model Elektrolit Non Random Two Liquid (E-NRTL)

Secara umum energi Gibbs eksek pada model E-NRTL merupakan gabungan dari dua faktor yaitu *long range* (LR) *forces*

dan *short range* (SR) *forces*. Pada larutan encer dimana jarak antar molekul cukup jauh maka energi Gibbs eksek didominasi oleh interaksi LR *force*. Sedangkan pada larutan pekat dimana jarak antar molekul lebih dekat maka energi Gibbs eksek didominasi oleh interaksi SR *force*.

Austgen et al (1989) mengembangkan model elektrolit NRTL yang dalam hal ini terdiri dari tiga kontribusi. Pertama, *Long Range force* terdiri dari dua kontribusi yaitu model PDH (Pitzer-Debye-Huckel) yang menghitung adanya kontribusi elektrostatis antar semua ion. Kontribusi kedua yaitu kontribusi *ion-reference-state-transfer* yang dinyatakan dengan, model persamaan Born. Ketiga adalah kontribusi *short range* yang dinyatakan dengan persamaan *local composition* elektrolit NRTL yang menghitung adanya interaksi *short range* semua spesies.

Total kontribusi terhadap energi Gibbs eksek adalah:

$$\frac{g_i^{ex*}}{RT} = \frac{g_{LR,i}^{ex*}}{RT} + \frac{g_{SR,i}^{ex*}}{RT} = \left(\frac{g_{PDH,i}^{ex*}}{RT} + \frac{g_{Born,i}^{ex*}}{RT} \right) + \frac{g_{lc,i}^{ex*}}{RT} \quad (2.39)$$

Atau

$$\ln \gamma_i = (\ln \gamma_{PDH,i} + \ln \gamma_{Born,i}) + \ln \gamma_{lc,i} \quad (2.40)$$

2.5.1 Long Range Forces

Model Pitzer-Debye-Huckel adalah ekspresi untuk energi Gibbs eksek, dimana nilai fraksi mol adalah satu untuk pelarut dan nol untuk ion-ion. Model Pitzer-Debye-Huckel ini merepresentasikan energi Gibbs eksek sebagai:

$$g_{PDH}^{ex*} = -RT \left(\sum_k x_k \right) \left(\frac{1000}{MW} \right)^{0.5} \left(\frac{4A_\phi I_x}{\rho} \right) \ln(1 + \rho I_x^{0.5}) \quad (2.41)$$

dimana:

x = fraksi mol

MW = berat molekul dari pelarut

ρ = parameter pendekatan model PDH yang terdekat
 I_x = Daya ionik yang dinyatakan dalam fraksi mol dan muatan z

$$I_x = \frac{1}{2} \sum_i x_i z_i^2 \quad (2.42)$$

Tanda (*) merujuk pada energi Gibbs eksese tak simetris.

Parameter Debye-Huckel, A_ϕ didapat dari :

$$A_\phi = \frac{1}{3} \left(\frac{2\pi N_0 \rho_s}{1000} \right)^{0.5} \left(\frac{e^2}{D_s kT} \right)^{1.5} \quad (2.43)$$

dimana:

N_0 = bilangan Avogadro (6.02×10^{23})
 ρ_s = densitas pelarut
 e = muatan elektron (1.6×10^{-19} Coulomb)
 D_s = konstanta dielektrik pelarut
 k = konstanta Boltzmann (1.38×10^{-23} J/K)

Konstanta dielektrik dri pelarut dihitung sebagai :

$$D_s = \sum_i x_i D_i \quad (2.44)$$

dimana:

x_i = fraksi massa spesies i
 D_i = konstanta dielektrik spesies i

2.5.2 Persamaan Born

Pada pelarut campuran, kondisi acuan untuk ion-ion menjadi kacau karena perubahan konstanta dielektrik. Persamaan Born diperkenalkan untuk kontribusi long-range terhadap energi Gibbs guna mempertahankan kondisi acuan pada pengenceran tak berhingga dengan air untuk ion-ion tersebut. Bentuk persamaannya adalah :

$$g_{Born}^{ex} = RT \left(\frac{e^2}{2kT} \right) \left(\sum_i \frac{x_i z_i^2}{r_i} \right) \left(\frac{1}{D_m} - \frac{1}{D_w} \right)^{1/2} x 10^{-2} \quad (2.45)$$

Dimana D_m dan D_w masing-masing adalah konstanta dielektrik campuran pelarut dan air. Koreksi ini menentukan perbedaan energi Gibbs diantara ion-ion dalam campuran pelarut dan dalam air.

2.5.3 NRTL Term Sebagai Kontribusi Local Composition

Saat larutan menjadi lebih pekat, term yang mendeskripsikan interaksi diantara spesies netral dan spesies ionik dan spesies netral dan spesies netral menjadi penting. Interaksi tersebut digambarkan secara lokal, ataiu *short-range forces*. Wilson (1964) menurunkan persamaan untuk energi pencampuran non-elektrolit. Dasar penurunan adalah distribusi molekul i dan j , di sekitar pusat molekul i , diberikan oleh :

$$\frac{x_{ij}}{x_{ii}} = \frac{x_j \exp\left(-\frac{g_{ji}}{RT}\right)}{x_k \exp\left(-\frac{g_{ii}}{RT}\right)} \quad (2.46)$$

Renon dan Praunitz (1968) merumuskan ulang persamaan di atas dalam model NRTL, hingga pada modifikasi distribusi molekuler untuk menghitung pencampuran *non-random* :

$$\frac{x_{ij}}{x_{ii}} = \frac{x_j \exp\left(-\alpha_{ij} \frac{g_{ji}}{RT}\right)}{x_i \exp\left(-\alpha_{ij} \frac{g_{ii}}{RT}\right)} \quad (2.47)$$

α adalah parameter variabel. Nilainya berkisar antara 0,1 hingga 0,4 tergantung dari molekul dan molekul dan pelarut dalam sistem (Cullinane, 2004). Penambahan parameter non-random α , memperluas aplikasi model NRTL.

Baik antara model Wilson dan NRTL, keduanya menggunakan persamaan energi Gibbs bebas pencampuran dalam bentuk :

$$\frac{g^M}{RT} = \sum_i x_i \ln \xi_i \quad (2.48)$$

Dimana ξ adalah fraksi volume i sekitar pusat molekul. Fraksi volume diturunkan dari distribusi molekuler yang diberikan di atas dan dapat ditulis :

$$\xi_i = \frac{x_i V_i \exp\left(-\frac{g_{ij}}{RT}\right)}{\sum_j x_j V_j \exp\left(-\frac{g_{ij}}{RT}\right)} \quad (2.49)$$

Dimana V menunjukkan volume molar. Energi dari pencampuran dihubungkan dengan energi Gibbs eksres melalui eksres melalui persamaan:

$$\frac{g^{ex}}{RT} = \frac{g^M}{RT} - \sum_i x_i \ln x_i \quad (2.50)$$

Pengembangan persamaan ini dilakukan oleh Chen et al (1986) mengembangkan persamaan ini untuk larutan multi-komponen dari spesies netral maupun ionik. Pengembangan model ini oleh Chen, menggabungkan tiga sel atau grup yang berbeda dari interaksi ion dan molekul, dengan membuat 2 asumsi untuk gambaran fisik dari interaksi spesies:

1. Dua sel termasuk pusat kation, c atau pusat anion, a , dan diasumsikan mengalami saling tolakutnuk ion sejenis. Ini berarti pusat ion dikelilingi oleh molekul dan ion yang berbeda muatan.
2. Satu sel terdiri dari sebuah pusat molekul lokal, m , dengan muatan netral, yaitu muatan sekitar pusat molekul sama dengan nol.

Interaksi antar sel dapat didefinisikan sebagai interaksi dua spesies. Energi Gibbs dapat dimodelkan sebagai fungsi dari interaksi model berikut :

$$\tau_{ji,ki} = \frac{G_{ji} - G_{ki}}{RT} \quad (2.51)$$

Dalam sistem elektrolit, semua komponen dapat dikategorikan dalam tiga tipe :

- a. Spesies molekul (m) : solute dan solvent
- b. Spesies *cationic* (c) : kation
- c. Spesies *anionic* (a) : anion

Sebuah model global dapat disusun sebagai jumlah ineteraksi spesifik spesies pada komposisi rerata larutan. Sehingga energi Gibbs ekkses dari *local interaction* dapat diprediksi dari model NRTL sebagai berikut :

$$\frac{G_{lc}^{ex}}{RT} = \sum_m \left(X_m \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c X_c \left(\sum_{a'} \left(\frac{X_{a'} \sum_j G_{jc,a'c} \tau_{jc,a'c}}{\sum_a X_a \sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) \right) + \sum_a X_a \left(\sum_{c'} \left(\frac{X_{c'} \sum_j G_{ja,c'a} \tau_{ja,c'a}}{\sum_c X_c \sum_k X_k G_{ka,c'a}} \right) \right) \quad (2.52)$$

$$X_j = C_j x_j \quad ; \quad j = m, c, a \quad (2.53)$$

$$x_j = \frac{n_j}{\sum_j n_j} \quad (2.54)$$

$$G_{ja,c'a} = \exp(-\alpha_{ja,c'a} \tau_{ja,c'a}) \quad (2.55)$$

$$G_{jc,a'c} = \exp(-\alpha_{jc,a'c} \tau_{jc,a'c}) \quad (2.56)$$

$$G_{jm} = \exp(-\alpha_{im} \tau_{im}) \quad (2.57)$$

dimana :

$$X_j = x_j C_j ;$$

($C_j = Z_j$ untuk ion-ion dan sama dengan 1 untuk molekul)

α = parameter nonrandomness

τ = parameter interaksi biner

Koefisien aktivitas untuk masing-masing komponen dapat dihitung sebagai berikut :

$$\begin{aligned} \ln \gamma_m^{lc} = & \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} - \sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \left(\tau_{mm'} - \frac{\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \right) \\ & + \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \left(\tau_{mc,ac} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \right) \\ & + \sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \left(\tau_{ma,ca} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \right) \end{aligned} \quad (2.58)$$

Untuk spesies kation :

$$\begin{aligned} \frac{1}{z_c} \ln \gamma_c^{lc} = & \sum_a Y_a \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} + \sum_m \frac{X_m G_{cm}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{cm} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) \\ & + \sum_a \sum_{c'} \frac{Y_{c'} X_a G_{ca,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'ac}} \left(\tau_{ca,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{km,c'a} \tau_{km,c'a}}{\sum_k X_k G_{km,c'a}} \right) \end{aligned} \quad (2.59)$$

Untuk spesies anion :

$$\frac{1}{z_a} \ln \gamma_a^{lc} = \sum_c Y_{aca} \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} + \sum_m \frac{X_m G_{am}}{\sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{am} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c \sum_{a'} \frac{Y_{a'} X_c G_{ac,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \left(\tau_{ac,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) \quad (2.60)$$

Dari persamaan (2.52)-(2.60) dibutuhkan parameter-parameter sebagai berikut :

Nonrandomness parameter

$$\alpha_{mm'} = \alpha_{m'm'}, \alpha_{m,cm} = \alpha_{cm,m}, \alpha_{ca,ca'} = \alpha_{ca'ca}, \alpha_{ca,c'a} = \alpha_{c'a,ca}, \alpha_{cm}, \alpha_{am}, \alpha_{mc,ac}, \alpha_{ma,ca}$$

Binary interaction parameter

$$\tau_{mm'}, \tau_{m'm'}, \tau_{m,ca}, \tau_{ca,m}, \tau_{ca,ca'}, \tau_{ca'ca}, \tau_{ca,c'a}, \tau_{c'a,ca}, \tau_{cm}, \tau_{am}, \tau_{mc,ac}, \tau_{ma,ca}$$

Binary interaction parameter dihitung dari model binary parameter yang telah disesuaikan. Dan, dapat dihitung sebagai berikut :

$$\alpha_{cm} = \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \quad (2.61)$$

$$\alpha_{am} = \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \quad (2.62)$$

Jumlah fraksi komposisi muatan anion, Y_a , dan jumlah fraksi komposisi muatan kation, Y_c , dapat dihitung sebagai berikut :

$$Y_a = \frac{X_a}{\sum_{a'} X_{a'}} \quad (2.63)$$

$$Y_c = \frac{X_c}{\sum_{c'} X_{c'}} \quad (2.64)$$

Kemudian, G_{cm} dan G_{am} dapat dihitung sebagai berikut :

$$G_{cm} = \sum_a Y_a G_{ca,m} \quad (2.65)$$

$$G_{am} = \sum_c Y_c G_{ca,m} \quad (2.66)$$

Kemudian, τ_{cm} dan τ_{am} dapat dihitung sebagai berikut :

$$\tau_{cm} = -\frac{\ln(G_{cm})}{\alpha_{cm}} \quad (2.67)$$

$$\tau_{am} = -\frac{\ln(G_{am})}{\alpha_{am}} \quad (2.68)$$

Selanjutnya dapat dihitung parameter-parameter yang lain sebagai berikut :

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm} \quad (2.69)$$

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am} \quad (2.70)$$

$$\tau_{ma,ca} = \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (2.71)$$

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (2.72)$$

$$G_{mc,ac} = \exp(\alpha_{mc,ac} \tau_{mc,ac}) = \exp(\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \quad (2.73)$$

$$G_{ma,ca} = \exp(\alpha_{ma,ca} \tau_{ma,ca}) = \exp(\alpha_{am} \tau_{ma,ca}) \quad (2.74)$$

Kondisi acuan kontribusi NRTL dapat dikonversikan ke bentuk asimetri dengan koreksi terhadap koefisien aktivitas pelarutan tak berhingga.

$$g_{NRTL}^{ex} = \frac{g_{NRTL}^{ex}}{RT} + \left(\sum_{m \neq w} x_m \ln \gamma_m^\infty + \sum_c x_c \ln \gamma_c^\infty + \sum_a x_a \ln \gamma_a^\infty \right) \quad (2.75)$$

$$\ln \gamma_m^\infty = \tau_{wm} + G_{mw} \tau_{mw} \quad (2.76)$$

$$\ln \gamma_c^\infty = Z_c \left(G_{cw} \tau_{cw} + \frac{\sum_{a'} x_{a'} \tau_{wc,a'c}}{\sum_{a''} x_{a''}} \right) \quad (2.77)$$

$$\ln \gamma_a^\infty = Z_a \left(G_{aw} \tau_{aw} + \frac{\sum_{c'} x_{c'} \tau_{wa'a'}}{\sum_{c''} x_{c''}} \right) \quad (2.78)$$

Subskrip w menunjukkan air.

2.6 Parameter Interaksi Pada Model E-NRTL

Ada tiga jenis parameter interaksi biner dalam kontribusi NRTL untuk energi Gibbs eksese yaitu, molekul-molekul, molekul-pasangan ion, pasangan ion-pasangan ion (anion-kation). Parameter interaksi molekul-molekul T dinyatakan dengan persamaan :

$$\tau = A + B/T(K) \quad (2.79)$$

Parameter interaksi untuk molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul sesuai persamaan berikut :

$$\tau = A + B \left(\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353.15(K)} \right) \quad (2.80)$$

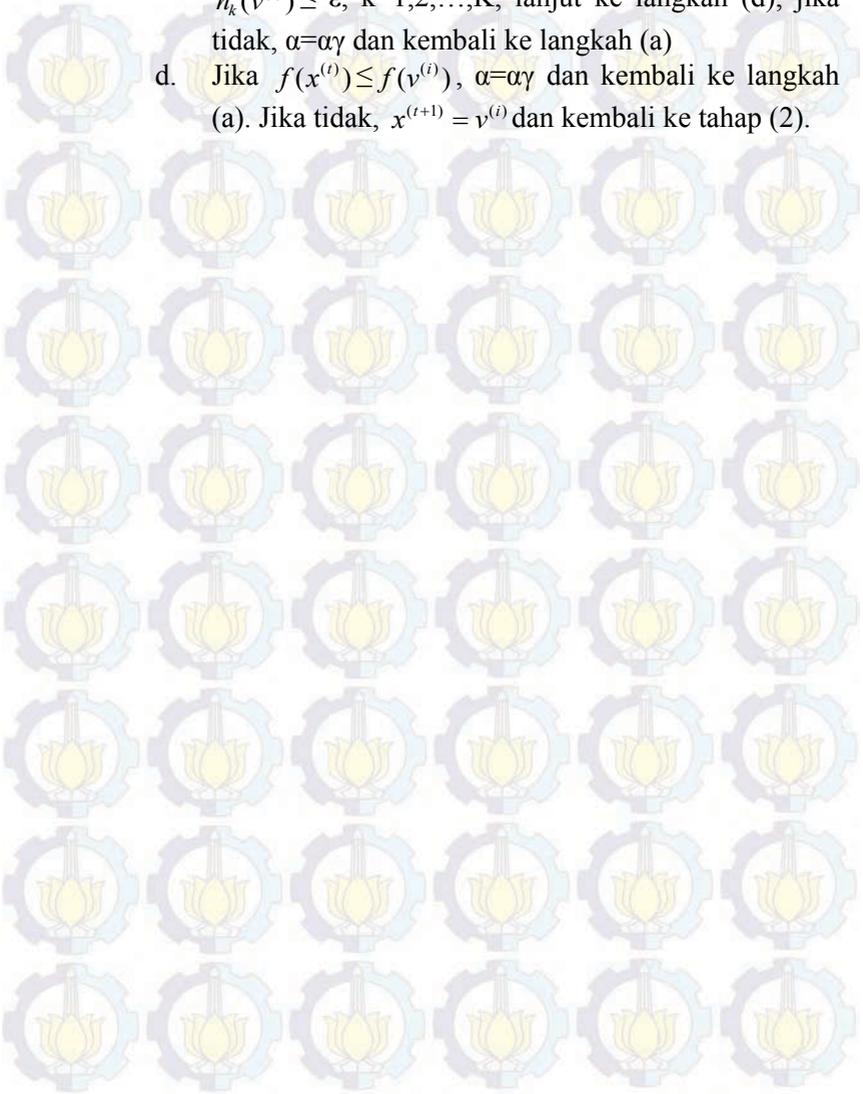
Nilai faktor *non-randomness* NRTL adalah 0,2 untuk molekul-molekul, air-pasangan-ion dan pasangan ion-air (Liu, 1999). Sedangkan untuk pasangan amine-ion adalah 0,1. Interaksi antar pasangan ion pada umumnya tidak signifikan dan tidak dimasukkan dalam model ini.

2.7 Metode GRG (*Generalized Reduced Gradient*) Non Linear

Arora (2012) menjelaskan metode *reduced gradient* berdasarkan teknik eliminasi variabel sederhana untuk permasalahan dengan constrain berupa persamaan. Metode *Generalized Reduced Gradient* merupakan perluasan metode *reduced gradient* untuk menangani permasalahan dengan constrain berupa pertidaksamaan nonlinear. Algoritma metode GRG Untuk meminimalkan fungsi $f(x)$, $x=[x_1, x_2, \dots, x_n]$ dengan constrain $h_k(x)=0$, $k=1,2, \dots, K$, adalah sebagai berikut:

1. Tentukan nilai awal x^0 dan search parameter α^0 , serta error ε dan reduction parameter γ , $0 < \gamma < 1$.
2. Bagi x menjadi \hat{x} (basic variable) dan \bar{x} (non-basic variable), dengan ketentuan jumlah non-basic variable merupakan selisih antara jumlah total variabel dengan jumlah persamaan constrain
3. Hitung nilai turunan $\nabla \bar{f}(x^{(t)})$ dan $\nabla \hat{f}(x^{(t)})$
4. Hitung nilai $C = [\nabla_1 \bar{h}_k; \nabla_2 \bar{h}_k; \dots; \nabla_K \bar{h}_k]$ dan $J = [\nabla_1 \hat{h}_k; \nabla_2 \hat{h}_k; \dots; \nabla_K \hat{h}_k]$
5. Hitung $\nabla \tilde{f}(x^{(t)}) = \nabla \bar{f}(x^{(t)}) - \nabla \hat{f}(x^{(t)}) J^{-1} C$
6. If $\|\nabla \tilde{f}(x^{(t)})\| \leq \varepsilon$, berhenti. Jika tidak, tetapkan $\bar{d} = -(\nabla \tilde{f})^T$, $\hat{d} = -J^{-1} C \bar{d}$, dan $d = (\hat{d}, \bar{d})^T$
7. Tetapkan search parameter $\alpha = \alpha^0$
8. Untuk $i=1,2,3, \dots$:
 - a. Hitung $v^{(i)} = x^{(t)} + \alpha d$. Jika $|h_k(v^{(i)})| \leq \varepsilon$, $k=1,2, \dots, K$, lanjut ke (d). Jika tidak, lanjutkan.
 - b. $\hat{v}^{(i+1)} = \hat{v}^{(i)} - J^{-1}_{\hat{v}} h(v^{(i)})$ dan $\bar{v}^{(i+1)} = \bar{v}^{(i)}$

- c. Jika $\|\hat{v}^{(i+1)} - \hat{v}^{(i)}\| > \varepsilon$, kembali ke (b). Jika tidak, jika $h_k(v^{(i)}) \leq \varepsilon$, $k=1,2,\dots,K$, lanjut ke langkah (d), jika tidak, $\alpha = \alpha\gamma$ dan kembali ke langkah (a)
- d. Jika $f(x^{(i)}) \leq f(v^{(i)})$, $\alpha = \alpha\gamma$ dan kembali ke langkah (a). Jika tidak, $x^{(i+1)} = v^{(i)}$ dan kembali ke tahap (2).





BAB III METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Deskripsi Penelitian

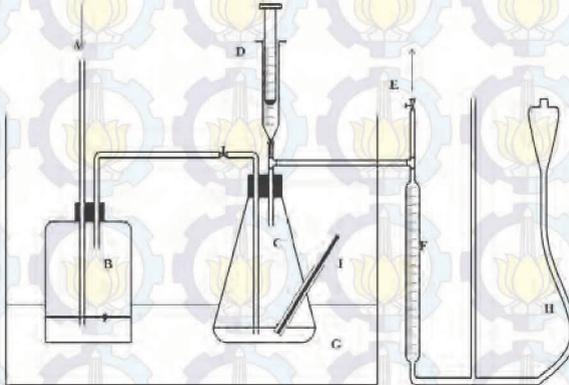
Penelitian ini dilakukan untuk mendapatkan data kesetimbangan fasa uap-cair gas CO_2 dalam sistem K_2CO_3 - $(\text{PZ}+\text{DEA})\text{-H}_2\text{O}$ pada tekanan atmosfer dan suhu 30°C , 40°C dan 50°C dalam berbagai konsentrasi promotor Piperazine-DEA dan berbagai konsentrasi gas CO_2 . Data kesetimbangan fasa uap-cair ini dapat dijadikan sebagai acuan pada perancangan kolom absorpsi untuk proses mereduksi gas CO_2 pada dunia industri dalam menentukan kinetika reaksi dengan *amine* atau memprediksi rate absorpsi gas menggunakan model.

Semua sifat ini tidak selalu dapat diukur secara langsung dengan metode eksperimen karena gas akan terjadi reaksi kimia dengan *solventnya*. Clarke (1964) dalam penelitiannya mengatakan adanya kemiripan struktur molekul dan parameter interaksi molekular antara CO_2 dan N_2O . Clarke (1964) mengasumsi bahwa rasio solubilitas CO_2 dan N_2O dalam air dan dalam larutan encer dari solven organik mendekati 5% pada temperatur sama, hal ini berarti ratio $\text{H}_{\text{CO}_2}/\text{H}_{\text{N}_2\text{O}}$ dalam air dan larutan dengan konsentrasi *amine* yang berbeda dianggap konstan pada temperatur konstan.

Metode penelitian yang akan dilakukan terdiri dari beberapa langkah, yakni langkah pertama melakukan eksperimen dengan menggunakan gas N_2O untuk memperoleh nilai konstanta Henry CO_2 . Langkah kedua, melakukan eksperimen dengan menggunakan gas CO_2 , dan dapat diperoleh nilai tekanan parsial CO_2 . Langkah terakhir melakukan korelasi dengan model E-NRTL.

3.2 Peralatan Percobaan

Peralatan yang digunakan dalam percobaan ini didasarkan pada peralatan yang digunakan dalam eksperimen Haimour and Sandall (1984) yang dimodifikasi. Skema alat dapat dilihat pada gambar 3.1. Prinsip kerja dari metode ini yaitu mengkontakkan volume tertentu suatu *liquid* dengan sejumlah gas pada temperatur dan tekanan konstan. Kesetimbangan bisa dicapai dengan adanya pengadukan hingga waktu tertentu sampai tercatat tidak ada perubahan dalam volume gas. Perubahan pada volume gas menyatakan bahwa ada sejumlah gas yang terlarut dalam *liquid*.



Gambar 3.1 Skema Peralatan Solubilitas CO₂

Keterangan :

- A. Gas CO₂
- B. Saturation Flask
- C. Absorption Flask
- D. Injeksi Liquid
- E. Ke udara luar
- F. Buret 50 mL
- G. Waterbath shaker
- H. Movable barometric leg
- I. Termometer

3.3 Bahan Percobaan

Bahan-bahan utama yang digunakan dalam percobaan :

1. Gas Carbon Dioxide (CO₂) 5, 10, 20 % CO₂
2. Gas Nitrogen Oxide (N₂O) ≥ 99 %
3. Potassium Karbonat (K₂CO₃)
4. Diethanolamine (DEA) ≥ 98 % Sigma-Aldrich
5. Piperazine (PZ) ≥ 99 % MERCK
6. Hydrogen Chloride 3 N (HCl)
7. Metil Orange (MO)
8. Phenolphthaline (PP)

3.4 Variabel Percobaan

Variabel dalam percobaan ini adalah:

1. Temperatur : 30, 40, 50°C
2. Komposisi larutan PZ-DEA : 5% total campuran
3. Konsentrasi gas umpan CO₂ : 5, 10, 20%

3.5 Pelaksanaan Percobaan

3.5.1 Persiapan Percobaan

Larutan *amine* disiapkan terlebih dahulu, yakni melarutkan K₂CO₃ dan Piperazine+DEA dengan aquades dengan kemurnian >99%. Konsentrasi larutan diukur dengan metode titrasi. Densitas larutan *amine* dan komponen-komponen murni ditentukan dengan menggunakan alat piknometer. Temperatur *bath* dikontrol dengan perbedaan ±0,05°C.

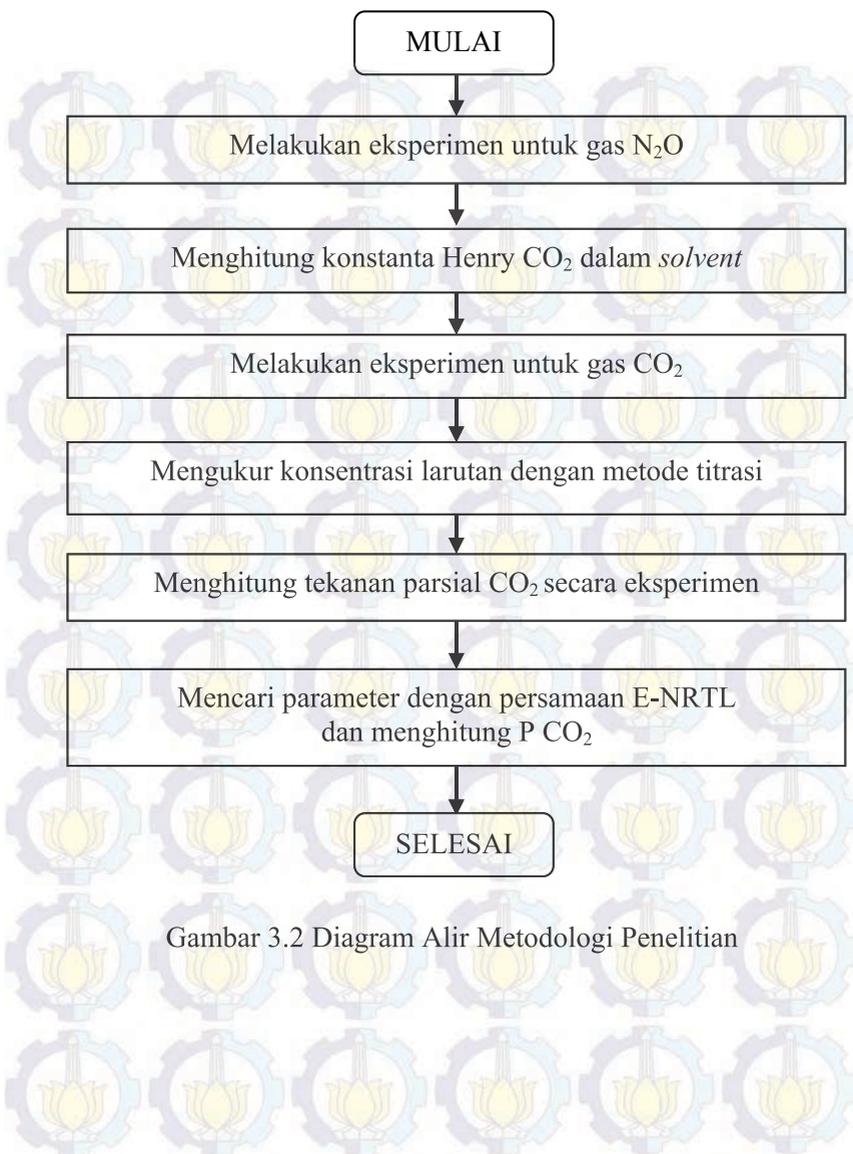
3.5.2 Prosedur Penelitian

1. Membuat sampel penelitian dengan campuran 30% K₂CO₃ dan 5% PZ-DEA
2. Mempersiapkan kondisi peralatan dengan cara mengalirkan gas CO₂ ke dalam rangkaian alat selama ±5 menit.
3. Menutup kedua keran sehingga gas CO₂ berada di dalam *Absorption Flask*

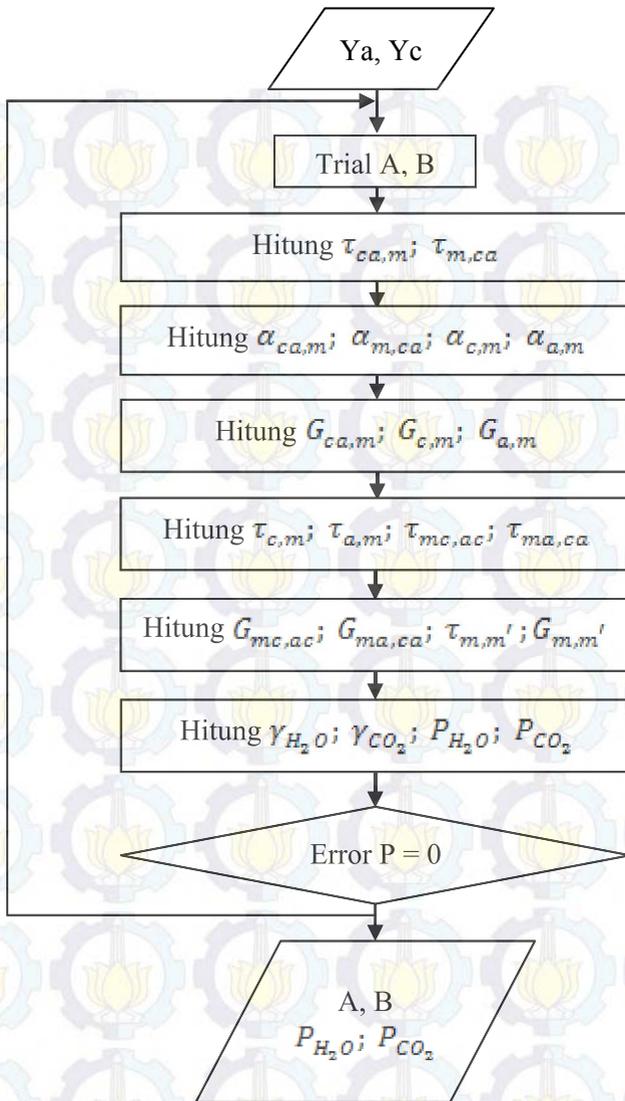
4. Mengkondisikan *Movable Manometric Leg* hingga level pada manometer air sama.
5. Melakukan injeksi larutan sebanyak 20 mL dengan *Syringe* kedalam *Absorption Flask* dan mencatat perubahan level pada manometer air.
6. Mengaduk sampel dengan *shaker* pada *waterbath*.
7. Mengukur volume gas setiap 4-5 menit sampai kesetimbangan tercapai. Kesetimbangan dikatakan tercapai ketika level pada manometer air tidak berubah.
8. Mengukur konsentrasi larutan dengan metode titrasi.
9. Melakukan langkah yang sama untuk nilai variabel penelitian yang lain.
10. Mengkorelasikan hasil penelitian dengan model E-NRTL.

3.5.2 Diagram Alir Metodologi Penelitian

Diagram alir percobaan ini ditampilkan dalam Gambar 3.2 dimana dari hasil eksperimen dengan gas CO_2 , dilakukan perhitungan tekanan parsial CO_2 secara eksperimen. Setelah itu, dilakukan *fitting* parameter untuk menentukan tekanan parsial CO_2 dengan menggunakan model E-NRTL, dimana untuk memperoleh parameter yang ditunjukkan pada Gambar 3.3.



Gambar 3.2 Diagram Alir Metodologi Penelitian



Gambar 3.3 Diagram Alir Perhitungan Parameter dengan Persamaan E-NRTL

3.6 Evaluasi Data

Berdasarkan data hasil percobaan dan data lain dari literatur maka dilakukan perhitungan-perhitungan sebagai berikut:

- Perhitungan konsentrasi kesetimbangan N_2O (C_{A^*})

$$V_{\text{gas terabsorb}} = V_{\text{sampel}} - \Delta V_{\text{gas}} \quad (3.1)$$

$$\text{mol total gas terabsorp} ((n) = \frac{PV}{RT} \quad (3.2)$$

$$C_{A^*} = \frac{\text{mol total gas terabsorp}}{\text{Volumeliquid}} \quad (3.3)$$

- Perhitungan konstanta Henry N_2O dalam larutan K_2CO_3

$$H_A = \frac{P_A}{C_A^*} \quad (3.4)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO_2 dalam larutan air

$$H_{CO_2, \text{water}} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (2.8249 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2044}{T}\right) \quad (3.5)$$

- Perhitungan konstanta Henry N_2O dalam larutan air

$$H_{N_2O, \text{water}} (kPa m^3 kmol^{-1}) = (8.5470 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2284}{T}\right) \quad (3.6)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO_2 dalam larutan K_2CO_3

$$\frac{H_{CO_2, a \text{ min e}}}{H_{N_2O, a \text{ min e}}} = \frac{H_{CO_2, \text{water}}}{H_{N_2O, \text{waer}}} \quad (3.7)$$

- Menghitung parameter Parameter nonrandom

$$\begin{aligned} \alpha_{mm'} &= \alpha_{m'm'}, \alpha_{m,cm} = \alpha_{cm,m}, \alpha_{ca,ca'} = \alpha_{ca'ca}, \alpha_{ca,c'a} \\ &= \alpha_{c'a,ca}, \alpha_{cm}, \alpha_{am}, \alpha_{mc,ac}, \alpha_{ma,ca} \end{aligned}$$

Parameter interaksi biner

$$\tau_{mm'}, \tau_{m'm'}, \tau_{m,ca}, \tau_{ca,m}, \tau_{ca,ca'}, \tau_{ca'ca}, \tau_{ca,c'a}, \tau_{c'a,ca}, \tau_{cm}, \tau_{am}, \tau_{mc,ac}, \tau_{ma,ca}$$

$$Y_a = \frac{X_a}{\sum_{a'} X_{a'}} \quad (3.8)$$

$$Y_c = \frac{X_c}{\sum_{c'} X_{c'}} \quad (3.9)$$

$$\tau = A + B \left(\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353.15(K)} \right) \quad (3.10)$$

Dengan nilai konstanta A dan B didapatkan dari hasil fitting parameter.

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm} \quad (3.11)$$

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am} \quad (3.12)$$

$$\alpha_{cm} = \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \quad (3.13)$$

$$\alpha_{am} = \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \quad (3.14)$$

$$G_{am} = \sum_c Y_c G_{ca,m} \quad (3.15)$$

$$G_{cm} = \sum_a Y_a G_{ca,m} \quad (3.16)$$

$$\tau_{cm} = - \frac{\ln(G_{cm})}{\alpha_{cm}} \quad (3.17)$$

$$\tau_{am} = -\frac{\ln(G_{am})}{\alpha_{am}} \quad (3.18)$$

$$\tau_{ma,ca} = \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (3.19)$$

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \quad (3.20)$$

$$G_{mc,ac} = \exp(\alpha_{mc,ac} \tau_{mc,ac}) = \exp(\alpha_{cm} \tau_{mc,ac}) \quad (3.21)$$

$$G_{ma,ca} = \exp(\alpha_{ma,ca} \tau_{ma,ca}) = \exp(\alpha_{am} \tau_{ma,ca}) \quad (3.22)$$

- Menghitung nilai estimasi koefisien aktifitas (γ) masing-masing komponen

$$\begin{aligned} \ln \gamma_m^{lc} = & \frac{\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}}{\sum_k X_k G_{km}} - \sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \left(\tau_{mm'} - \frac{\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}}{\sum_k X_k G_{km'}} \right) \\ & + \sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \left(\tau_{mc,ac} - \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} \right) \\ & + \sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \left(\tau_{ma,ca} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\frac{1}{z_c} \ln \gamma_c^{lc} = \sum_a Y_a \frac{\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}}{\sum_k X_k G_{kc,ac}} + \frac{\sum_m X_m G_{cm}}{m \sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{cm} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c \sum_a \frac{Y_c X_a G_{ca,c'a}}{\sum_k X_k G_{ka,c'a}} \left(\tau_{ca,c'a} - \frac{\sum_k X_k G_{km,c'a} \tau_{km,c'a}}{\sum_k X_k G_{km,c'a}} \right) \quad (3.24)$$

$$\frac{1}{z_a} \ln \gamma_a^{lc} = \sum_c Y_{aca} \frac{\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} + \frac{\sum_m X_m G_{am}}{m \sum_k X_k G_{km}} \left(\tau_{am} - \frac{\sum_k X_k G_{km} \tau_{km}}{\sum_k X_k G_{km}} \right) + \sum_c \sum_a \frac{Y_{a'} X_c G_{ac,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \left(\tau_{ac,a'c} - \frac{\sum_k X_k G_{ka,a'c} \tau_{kc,a'c}}{\sum_k X_k G_{kc,a'c}} \right) \quad (3.25)$$

- Membuat kurva solubilitas pada berbagai suhu, perbandingan hasil eksperimen dengan data hasil estimasi.
- Membuat kurva pengaruh suhu terhadap CO₂ terabsorp pada berbagai konsentrasi umpan gas CO₂.
- Membuat kurva hubungan antara P_{CO₂} dengan CO₂ loading dengan membandingkan hasil eksperimen dengan hasil estimasi.

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui pengaruh penambahan campuran Piperazine-DEA terhadap solubilitas CO₂ dalam larutan 30% berat K₂CO₃ untuk berbagai variabel penambahan Piperazine-DEA dengan total 5% berat campuran menggunakan konsentrasi CO₂ umpan yang berbeda dari 5% hingga 20% dalam range suhu 30-50 °C.

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan fasa uap-cair CO₂ dalam larutan K₂CO₃ dengan promotor campuran Piperazine-DEA dalam berbagai konsentrasi *solvent*, konsentrasi CO₂ dan suhu pada tekanan atmosferik. Data penelitian yang didapatkan akan dikorelasikan dengan menggunakan metode E-NRTL sehingga bisa memprediksi kondisi di luar data penelitian.

4.1 Validasi Peralatan Penelitian

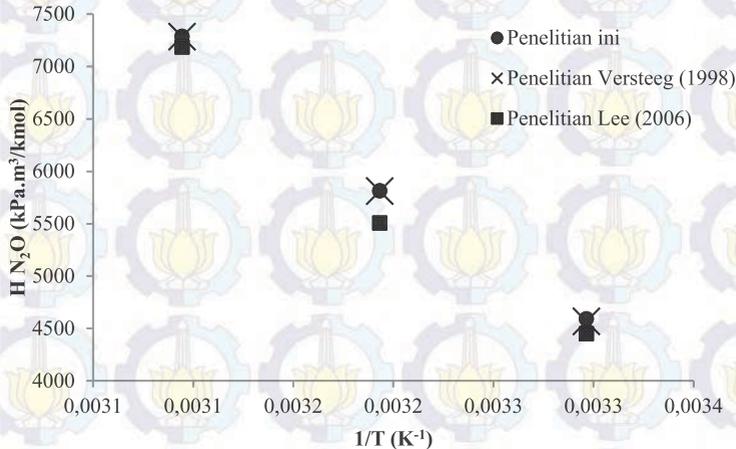
Validasi peralatan penelitian dilakukan menggunakan air sebagai pelarut. Validasi ini mengacu pada hasil eksperimen penelitian sebelumnya yaitu Versteeg (1988) dan Lee (2006) yang dilakukan pada suhu 30–50°C. Hasil uji validasi ditunjukkan pada Tabel 4.1 berikut:

Tabel 4.1 Hasil Validasi Peralatan Penelitian

H _{N2O} (kPa.m ³ /kmol) (Penelitian ini)	H _{N2O} (kPa.m ³ /kmol) (Versteeg, 1988)	H _{N2O} (kPa.m ³ /kmol) (Lee, 2006)
4352	4568	4450
5889	5811	5504
7261	7282	7184

Dari Tabel 4.1 tersebut terlihat bahwa harga konstanta Henry hasil validasi telah sesuai dengan harga yang diperoleh dari hasil eksperimen Versteeg (1988) dan Lee (2006). Hal ini

menunjukkan bahwa peralatan penelitian telah memadai untuk digunakan dalam melakukan penelitian pengaruh penambahan Piperazine dan DEA terhadap solubilitas karbondioksida dalam larutan potassium karbonat (K_2CO_3).



Gambar 4.1 Hasil Validasi Peralatan Eksperimen

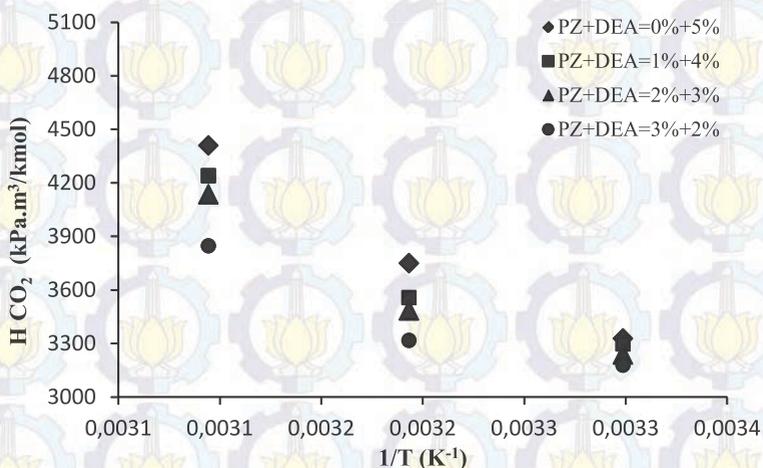
4.2 Hasil Eksperimen dan Pembahasan

a. Solubilitas CO₂ secara Fisik

Data solubilitas gas CO₂ dalam pelarut alkanolamine tidak dapat diukur secara langsung. Oleh karena itu, analogi gas N₂O dipakai untuk mengestimasi solubilitas gas CO₂ dalam pelarut alkanolamine. Dalam penelitian ini, dilakukan dengan variabel konsentrasi awal larutan K₂CO₃ 30%, PZ-DEA 0-5%, 1-4%, 2-3%, dan 3-2% menggunakan konsentrasi CO₂ umpan yang berbeda 5%, 10%, dan 20% CO₂ dalam range suhu 30-50 °C. Data solubilitas fisik CO₂ dalam pelarut diperoleh dari persamaan analogi N₂O yang telah dikemukakan oleh Clarke (1964):

$$\frac{H_{CO_2, a \text{ min } e}}{H_{N_2O, a \text{ min } e}} = \frac{H_{CO_2, water}}{H_{N_2O, water}} \quad (4.1)$$

Untuk mendapatkan data solubilitas N_2O dan CO_2 dalam air, dapat digunakan persamaan (2.22) dan (2.23) berdasarkan studi yang dilakukan oleh Versteeg dan Swaaij (1988). Sedangkan untuk data solubilitas N_2O dalam pelarut didapatkan dari hasil penelitian ini, sehingga data-data yang dibutuhkan untuk menghitung data solubilitas CO_2 dalam pelarut dengan persamaan (4.1) telah terpenuhi. Data solubilitas N_2O yang dihasilkan dalam setiap pelarut $K_2CO_3+PZ+DEA-H_2O$ pada konsentrasi ini ditunjukkan pada Gambar 4.2 di bawah ini:



Gambar 4.2 Solubilitas CO_2 pada 30% K_2CO_3 dengan Promotor PZ-DEA

Dari Gambar 4.2 menunjukkan bahwa hubungan antara $1/suhu$ dan konstanta Henry berbanding terbalik, semakin tinggi harga $1/suhu$ maka nilai konstanta Henry semakin kecil. Hal ini berarti dengan peningkatan suhu menyebabkan peningkatan harga dari konstanta Henry dan semakin tinggi harga dari konstanta Henry menunjukkan bahwa gas semakin sulit terlarut dalam larutan. Sehingga dengan kata lain meningkatnya nilai $1/suhu$ menyebabkan kelarutan gas oleh liquid semakin besar dan itu

terjadi pada suhu yang lebih rendah, CO₂ lebih banyak terlarut di larutan. Dari grafik diatas menunjukkan bahwa pelarut 3-2% PZ-DEA memiliki nilai konstanta Henry terkecil jika dibandingkan dengan campuran lainnya. Hal ini menunjukkan bahwa daya solubilitas CO₂ secara fisik dengan pelarut 3-2% PZ-DEA lebih baik dan melarutkan gas lebih banyak jika dibandingkan dengan pelarut lainnya.

b. Solubilitas CO₂ secara Kimia

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan mengetahui pengaruh penambahan zat aditif atau promotor Piperazine-DEA terhadap solubilitas gas karbon dioksida (CO₂) dalam larutan kalium karbonat (K₂CO₃) pada tekanan atmosferik. Setelah terjadi kesetimbangan dilakukan pengambilan sampel larutan untuk pengukuran densitas larutan dan analisa larutan dengan titrasi. Titrasi dilakukan untuk mengetahui kadar CO₃²⁻ dan HCO₃⁻ dalam larutan. Analisa kadar HCO₃⁻ dalam larutan dilakukan untuk mengetahui jumlah gas CO₂ yang bereaksi dengan larutan K₂CO₃ karena CO₂ yang terabsorb ada yang bereaksi dan terlarut dengan larutan K₂CO₃. Pengukuran densitas dilakukan dengan cara yang sederhana dengan menggunakan piknometer.

Reaksi yang terjadi dalam kesetimbangan larutan:



Di dalam larutan, aditif PZ akan meningkatkan jumlah terbentuknya HCO₃⁻



Sehingga akan meningkatkan jumlah CO₂ yang bereaksi.



Hasil perhitungan besarnya CO₂ yang terabsorb dengan larutan dapat dilihat pada Tabel 4.2 :

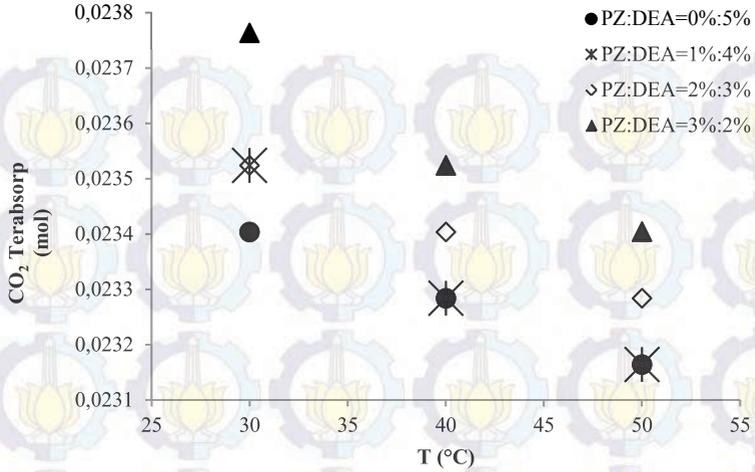
Tabel 4.2 Hasil Perhitungan CO₂ Terabsorp

PZ	DEA	Suhu (°C)	CO ₂ Terabsorp (mol)		
			Umpan 5% CO ₂	Umpan 10% CO ₂	Umpan 20% CO ₂
0	5	30	0,0234	0,0252	0,0294
		40	0,0233	0,0251	0,0292
		50	0,0232	0,0250	0,0290
1	4	30	0,0235	0,0253	0,0295
		40	0,0233	0,0251	0,0293
		50	0,0232	0,0250	0,0292
2	3	30	0,0235	0,0253	0,0295
		40	0,0234	0,0252	0,0294
		50	0,0233	0,0251	0,0293
3	2	30	0,0238	0,0254	0,0296
		40	0,0235	0,0253	0,0295
		50	0,0234	0,0252	0,0294

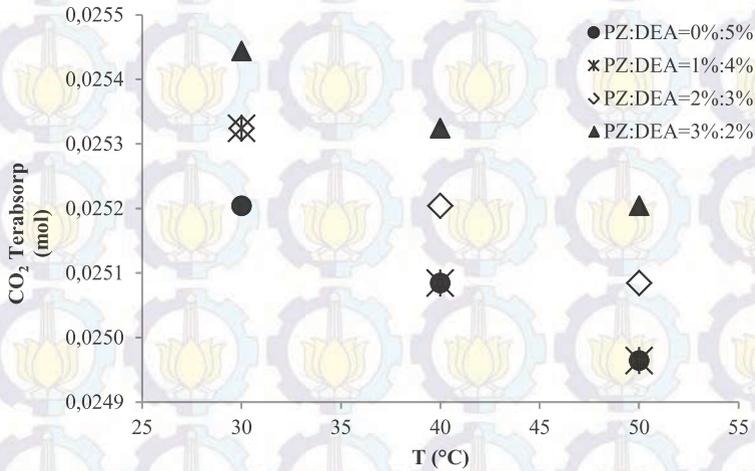
Dari Tabel 4.2, dapat dilihat hasil perhitungan dari jumlah mol CO₂ terabsorp, CO₂ terabsorp merupakan jumlah antara CO₂ bereaksi dan CO₂ terlarut. CO₂ terlarut disini merupakan CO₂ dalam larutan yang tidak bereaksi. Untuk perhitungan jumlah CO₂ terlarut dengan menggunakan rumus konstanta kesetimbangan dari Austgen and Rochelle (1991) yaitu:

$$\ln K_x = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 T + C_4 \ln T \quad (4.6)$$

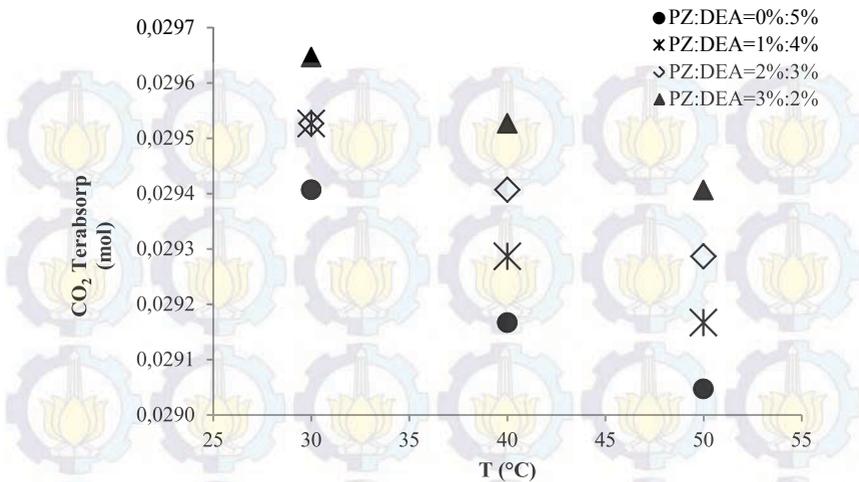
Hubungan CO₂ yang terabsorp dengan suhu dapat dilihat pada Gambar 4.3 - 4.5:



Gambar 4.3 Pengaruh Suhu terhadap CO₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 5% CO₂



Gambar 4.4 Pengaruh Suhu terhadap CO₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 10% CO₂



Gambar 4.5 Pengaruh Suhu terhadap CO₂ Terabsorp dengan Konsentrasi Gas Umpan 20% CO₂

Dari Gambar 4.3–4.5 terlihat bahwa, pada konsentrasi umpan CO₂ dan campuran promotor yang sama, dengan meningkatnya suhu dari 30–50°C maka jumlah mol CO₂ yang terabsorp mengalami penurunan. Hal ini disebabkan K₂CO₃ dengan promotor piperazine adalah larutan yang memiliki panas reaksi yang rendah dan bersifat *eksoterm*, sehingga kenaikan suhu akan menurunkan laju reaksi larutan benfield dengan gas CO₂. Kenaikan suhu berdampak pada penurunan kadar ion HCO₃⁻ dalam larutan.

Di samping itu, pada suhu dan campuran promotor yang sama, jumlah CO₂ terabsorp lebih banyak pada konsentrasi CO₂ umpan yang lebih tinggi. Pada umpan 5% CO₂, terabsorp sebanyak 0,23164–0,23763 mol. CO₂ terabsorp mengalami kenaikan pada umpan 10% CO₂, yaitu 0,24965–0,25444 mol. Pada umpan 20% CO₂, berkisar diantara 0,29047–0,029646 mol CO₂ yang dapat terabsorp, nilai pada umpan 20% CO₂ merupakan yang tertinggi apabila dibandingkan dengan konsentrasi CO₂ umpan yang lainnya.

Selain itu, dapat dilihat pula bahwa promotor 3-2% PZ-DEA memiliki nilai CO_2 terabsorpsi tertinggi pada tiap konsentrasi umpan. Hal ini disebabkan oleh PZ yang dapat bereaksi lebih cepat dengan CO_2 dibandingkan *amine* lainnya. PZ adalah diamine, sehingga dapat mengabsorpsi 2 mol CO_2 per mol *amine* berdasarkan Cullinane (2005). Dari hasil yang didapatkan, terdapat beberapa data yang memiliki nilai CO_2 terabsorpsi berhimpit. Hal ini terjadi dikarenakan adanya pembulatan pada nilai CO_2 terabsorpsi yang sebenarnya nilai tersebut tidak persis sama, dimana nilai tersebut merupakan penjumlahan dari CO_2 terlarut dan CO_2 bereaksi. Nilai CO_2 terabsorpsi yang hampir sama ini dikarenakan adanya penambahan konsentrasi PZ yang seiringan dengan pengurangan konsentrasi DEA atau sebaliknya pada tiap variabel. Hal yang serupa terjadi pada penelitian Zulfetra dan Nuharani (2014).

Dari harga CO_2 terabsorpsi dalam larutan akan dapat diperoleh nilai CO_2 loading. CO_2 loading merupakan rasio antara jumlah total mol CO_2 yang mampu diabsorpsi terhadap total mol K^+ dan mol *amine* yang terkandung dalam larutan.

4.3 Korelasi dengan Model E-NRTL

Untuk melakukan perhitungan korelasi tekanan kesetimbangan dengan menggunakan data fraksi mol komponen pada kondisi kesetimbangan dari eksperimen, dihitung dengan model E-NRTL. Model E-NRTL ini telah cukup baik untuk memprediksi kelakuan larutan elektrolit lemah hingga elektrolit kuat. Selain itu, berdasarkan Chen dan Song (2004) menyatakan bahwa model E-NRTL (*Electrolyte Non Random Two Liquid*) telah diaplikasikan secara luas untuk menunjukkan sifat-sifat termodinamika dari berbagai macam sistem elektrolit. Misalnya, model ini dapat digunakan untuk menghitung koefisien aktivitas komponen-komponen larutan elektrolit. Untuk mendapatkan parameter biner yang digunakan dalam perhitungan koefisien aktivitas CO_2 dengan model E-NRTL, maka dilakukan *fitting Average Absolute Relative Deviation (AARD)* antara (P_{CO_2}) yang

didapatkan dari eksperimen dengan (P_{CO_2}) hasil perhitungan korelasi menggunakan *solver tool* pada *Microsoft Excel* dengan metode GRG (Generalized Reduced Gradient) Non Linear.

Dari metode *fitting* yang telah dilakukan, kemudian digunakan untuk menghitung tekanan parsial CO_2 hasil korelasi (P_{CO_2}) dapat ditabelkan hasilnya dalam Tabel 4.3 sampai 4.6 yang merupakan perbandingan antara P_{CO_2} hasil eksperimen dan hasil korelasi untuk metode *fitting* dapat dilihat pada berikut:

Tabel 4.3 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO_2 untuk 0-5% PZ-DEA

Konsentrasi Gas CO_2 Umpan	Suhu ($^{\circ}C$)	P CO_2 Experiment (Pa)	P CO_2 Korelasi (Pa)	Error P CO_2 (%)
5%	30	579,40	539,64	6,86%
	40	668,33	671,16	0,42%
	50	827,07	827,12	0,01%
10%	30	721,74	718,14	0,50%
	40	830,49	856,87	3,18%
	50	1016,75	993,49	2,29%
20%	30	1060,96	1060,96	0,00%
	40	1208,06	1259,55	4,26%
	50	1477,89	1462,30	1,05%

Tabel 4.4 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk 1-4% PZ-DEA

Konsentrasi Gas CO ₂ Umpan	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	567,24	546,25	3,70%
	40	623,61	590,09	5,38%
	50	787,64	788,29	0,08%
10%	30	704,85	703,48	0,19%
	40	774,04	773,42	0,08%
	50	961,19	975,25	1,46%
20%	30	1032,64	1029,05	0,35%
	40	1133,73	1130,04	0,33%
	50	1406,95	1382,82	1,72%

Tabel 4.5 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk 2-3% PZ-DEA

Konsentrasi Gas CO ₂ Umpan	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	538,26	549,84	2,15%
	40	618,04	591,92	4,23%
	50	772,34	762,77	1,24%
10%	30	667,27	685,84	2,78%
	40	768,16	773,67	0,72%
	50	919,98	928,96	0,98%
20%	30	974,94	997,00	2,26%
	40	1122,15	1149,22	2,41%
	50	1342,21	1342,22	0,00%

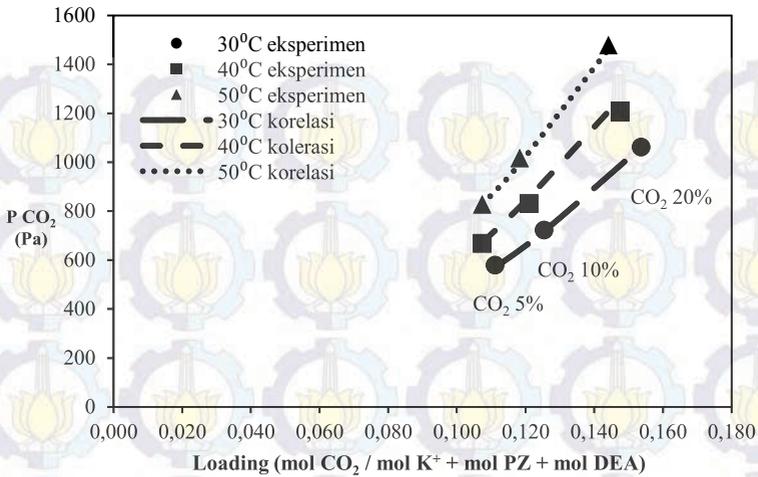
Tabel 4.6 Hasil Perhitungan Tekanan Parsial CO₂ untuk 3-2% PZ
DEA

Konsentrasi Gas CO ₂ Umpan	Suhu (°C)	P CO ₂ Experiment (Pa)	P CO ₂ Korelasi (Pa)	Error P CO ₂ (%)
5%	30	517,51	517,34	0,03%
	40	557,54	557,83	0,05%
	50	700,08	687,11	1,85%
10%	30	637,07	634,49	0,41%
	40	688,10	688,46	0,05%
	50	822,08	804,07	2,19%
20%	30	927,01	927,00	0,00%
	40	1000,26	1000,36	0,01%
	50	1193,54	1149,97	3,65%

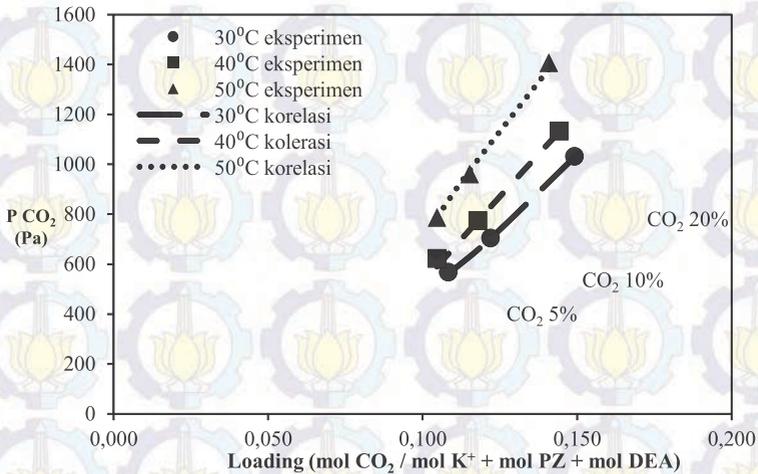
Dari Tabel 4.3 sampai 4.6 dapat terlihat bahwa, pada konsentrasi CO₂ umpan dan promotor yang sama, suhu berbanding lurus dengan tekanan parsial CO₂. Meningkatnya suhu akan menaikkan tekanan parsial CO₂ didalam larutan. Dapat dilihat juga bahwa pada hasil korelasi untuk setiap tekanan parsial gas CO₂ meningkat seiring dengan kenaikan suhu.

Selain itu, dari Tabel 4.3 sampai 4.6 dapat dilihat juga pada suhu dan campuran promotor yang sama, tekanan parsial CO₂ semakin tinggi pada konsentrasi gas umpan CO₂ yang lebih tinggi.

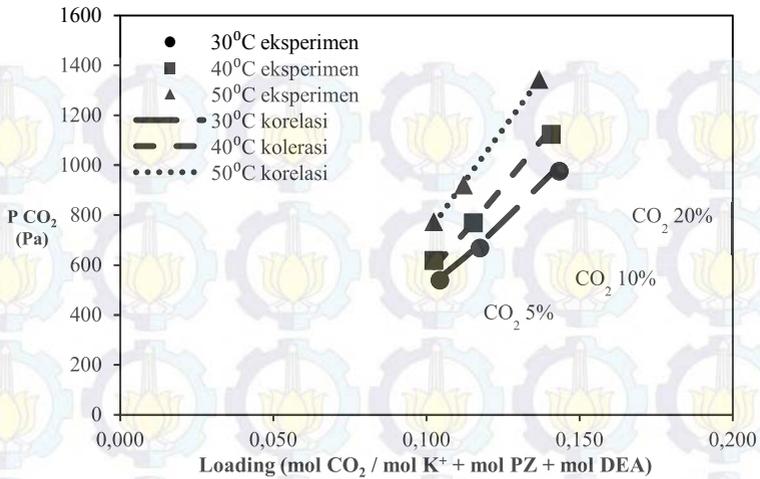
Untuk hubungan antara tekanan parsial CO₂ (P_{CO_2}) baik eksperimen maupun korelasi dari setiap campuran larutan terhadap CO₂ loading seperti yang ditunjukkan pada Gambar 4.6 - 4.9:



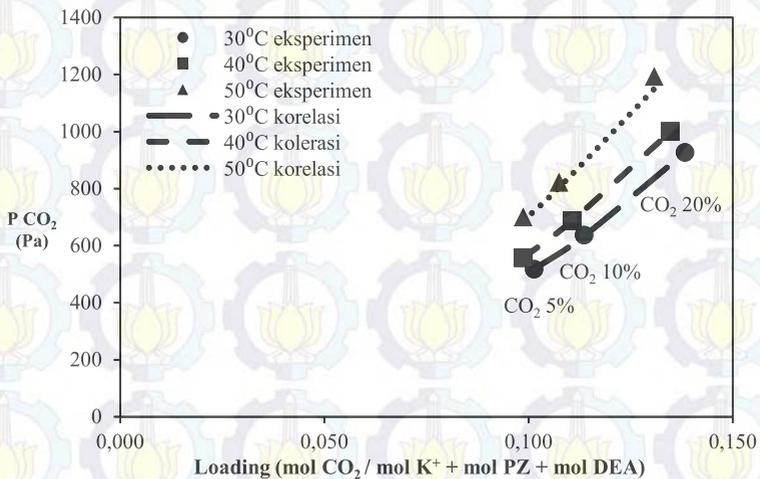
Gambar 4.6 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading Promotor 0-5% PZ-DEA



Gambar 4.7 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading Promotor 1-4% PZ-DEA



Gambar 4.8 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading Promotor 2-3% PZ-DEA



Gambar 4.9 Hubungan Tekanan Parsial CO₂ (P_{CO_2}) Eksperimen dan Korelasi dengan CO₂ Loading Promotor 3-2% PZ-DEA

Dari Gambar 4.6 sampai 4.9 dapat dilihat untuk hasil eksperimen maupun hasil korelasi menunjukkan bahwa, pada konsentrasi CO₂ umpan dan promotor yang sama, semakin besar gas CO₂ *loading* maka tekanan parsial juga semakin besar. Hal ini disebabkan karena terjadinya kenaikan konsentrasi CO₂ didalam larutan yang pada dasarnya selalu berkesetimbangan dengan konsentrasi CO₂ didalam fase gas (Kurniati, Y. dan Panca S.U, 2013). Pada konsentrasi CO₂ umpan dan promotor yang sama pula, suhu berbanding lurus dengan tekanan parsial CO₂. Meningkatnya suhu akan menaikkan tekanan parsial CO₂ didalam larutan. Dapat dilihat juga bahwa pada hasil korelasi untuk setiap tekanan parsial gas CO₂ meningkat seiring dengan kenaikan suhu. Dari Gambar 4.6 sampai 4.9 juga dapat dilihat bahwa, pada suhu dan campuran promotor yang sama, jumlah CO₂ *loading* lebih banyak pada konsentrasi CO₂ umpan yang lebih tinggi.

Penelitian ini dapat dibandingkan dengan penelitian Harimurti (2011) yang menggunakan 30% K₂CO₃ tanpa promotor pada suhu dan konsentrasi CO₂ umpan yang sama. Dalam penelitian Harimurti (2011) didapatkan CO₂ *loading* sebesar 0,027 (mol CO₂ / mol K⁺). Apabila dibandingkan dengan penelitian ini pada suhu dan konsentrasi CO₂ umpan yang sama, nilai yang CO₂ *loading* didapatkan bernilai 0,1386 hingga 0,1536 (mol CO₂ / mol K⁺ + mol PZ + mol DEA). Sehingga dapat disimpulkan bahwa penambahan promotor PZ-DEA dapat menaikkan CO₂ *loading* secara signifikan sebesar 413-468% dari nilai sebelumnya.

Hilliard (2008) melakukan penelitian menggunakan sistem CO₂-K₂CO₃-PZ-H₂O dengan suhu dan konsentrasi promotor PZ yang berbeda dengan penelitian ini, namun tren yang dihasilkan sama. Pada penelitian Hilliard (2008) menghasilkan nilai *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* sebesar 15,48%, sedangkan pada penelitian ini model E-NRTL memberikan hasil yang lebih baik pada sistem CO₂-K₂CO₃-(PZ+DEA)-H₂O dengan *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* 3,38% untuk *fitting* pada tiap variasi komposisi gas umpan.

DAFTAR PUSTAKA

Al-Rashed, O. A., S. H. Ali. Modeling the solubility of CO₂ and H₂S in DEA–MDEA alkanolamine solutions using the electrolyte–UNIQUAC model. *Sep Purif Technol.* **2012**, *94*, 71–8.

Altway, S. dan K. D. Marhetha. Prediksi Solubilitas Gas CO₂ di Dalam Larutan Potasium Karbonat dan MDEA Menggunakan Model Elektrolit UNIQUAC. *Skripsi Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember.* **2010**.

Altway. S, Kuswandi, dan A.Altway. Prediction of Gas-Liquid Equilibria of CO₂-K₂CO₃-MDEA-H₂O System by Electrolyte UNIQUAC Model. *IPTEK Journal of Engineering.* **2014**, *1*, 1.

Arora, J. S. Introduction to Optimum Design 3rd edition. Academic Press. USA. **2012**. 567-569.

Austgen, D.M., G.T. Rochelle, X. Peng, dan C.C. Chen. Model of Vapor-Liquid Equilibria for Aqueous Acid Gas-Alkanolamine Systems Using the Electrolyte-NRTL Equation. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1989**, *28*, 1060-1073.

Austgen, D.M., G.T. Rochelle, X. Peng, dan C.C. Chen. Model of Vapor-Liquid Equilibria for Aqueous Acid Gas-Alkanolamine Systems. 2. Representation of H₂S and CO₂ Solubility in Aqueous MDEA and CO₂ Solubility in Aqueous Mixtures of MDEA with MEA or DEA. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1991**, *30*, 543-555.

- Chen, C.C., Song, Y. Solubility Modeling with Nonrandom Two-Liquid Segment Activity Coefficient Model. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2004**, *43*, 8354.
- Clarke, J. K. A. Kinetics of Absorption of Carbon Dioxide In Monoethanolamine Solutions tt Short Contact Times. *Ind. Eng. Chem. Fundamental.* **1964**, *3*.
- Cullinane, J. Tim, G.T. Rochelle. Carbon dioxide Absorption with Aqueous Potassium Carbonate Promoted by Piperazine. *Chem Eng Sci.* **2004**, *59*, 3619-3630
- Dudley, Bob. BP Statistical Review of World Energy June 2014. BP. London. **2014**
- Dang, H. dan G.T. Rochelle. CO₂ Absorption Rate and Solubility in Monoethanolamine / Piperazine / Water. *Journal, Department of Chemical Engineering, University of Texas at Austin.* **2001**.
- Haimour, N., O.C. Sandall. Absorption of Carbon Dioxide Into Aqueous Methyl-diethanolamine. *Chem. Eng. Science.* **1984**, *39*.
- Hilliard, M.D. A Predictive Thermodynamic Model or an Aqueous Blend of Pottasium Carbonate, Piperazine, and Monoethanolamine for Carbon Dioxide Capture from Flue Gas. *Dissertation, Department of Chemical Engineering, The University of Texas at Austin.* **2008**.
- Kuswandi, K. Anam, dan Y.P. Laksana. Solubilitas Gas CO₂ dalam Larutan Potassium Karbonat. *Jurnal Teknik Kimia, Universitas Pembangunan Nasional.* **2008**.
- Kurniati, Y., A.Altway, Kuswandi. Eksperimental Penentuan Keseimbangan Uap-Cair dalam Sistem Larutan Elektrolit

CO₂-K₂CO₃-MDEA+DEA-H₂O. *Prosiding Seminar Nasional Teknik Kimia "Kejuangan"*. **2014**.

Lee, Seungmoon; Song, Ho-Jun; Maken, Sanjeev; Park, Jong-Jin; Park, Won-Jin. Physical Solubilities and Diffusivity of N₂O and CO₂ in Aqueous Solutions of Sodium Glycinate. *J Chem Eng Data*. **2006**, *51*, 504-509.

Liu, Y., L. Zhang, S. Watanasiri. Representing Vapor-Liquid Equilibrium for an Aqueous MEA-CO₂. *Ind. Eng. Chem.* **1999**, *38*.

Ma, Xiaoguang. Inna Kim. Ralf Beck. Hanna Knuutila dan Jens Petter Andreassen. Precipitation of Piperazine in The Piperazine-H₂O-CO₂ System. *Journal, Department of Chemical Engineering, NTNU, Norway*. **2010**.

Renon, H. Prausnitz, J.M. Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures. *AIChE J.* **1968**, *14*, 135-144

Suprpto, Y. The World of Energy Volume I. PT Badak NGL. Samarinda. **2007**

Suprpto, Y. The World of Energy Volume IV. PT Badak NGL. Samarinda. **2007**

Thee, H., Y. A. Suryaputradinata, K. A. Mumford, K. H. Smith, G.D. Silva, S.E. Kentish, G. W. Stevens. A kinetic and process modeling study of CO₂ capture with MEA-promoted potassium carbonate solutions. *Chem Eng J.* **2012**, *210*, 271-279.

Versteeg, G. F., van Swaaij, W. P. M., Solubility and Diffusivity of Acid Gases (CO_2 , N_2O) in Aqueous Alkanolamine Solutions. *J Chem Eng Data*. **1988**, 33, 29-34.

Winarno, H., G. Wibawa, dan Kuswandi. Eksperimental dan Estimasi Kesetimbangan Fase Uap-Cair Sistem Larutan Elektrolit CO_2 - K_2CO_3 -Diethanolamine- H_2O . *Jurnal Teknik Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember*. **2008**.

Zhang Y., H. Que, C.C. Chen. Thermodynamic modeling for CO_2 absorption in aqueous MEA solution with electrolyte NRTL model. *Fluid Phase Equilib*. **2011**, 311, 67-75.

Zulfetra, I. dan F. Nuharani. Eksperimen dan Estimasi Kesetimbangan Fasa Uap-Cair Sistem Larutan Elektrolit CO_2 - K_2CO_3 -(MDEA+DEA) dan CO_2 - K_2CO_3 -(Piperazine+DEA). *Skripsi Jurusan Teknik Kimia Institut Teknologi Sepuluh Nopember*. **2014**.

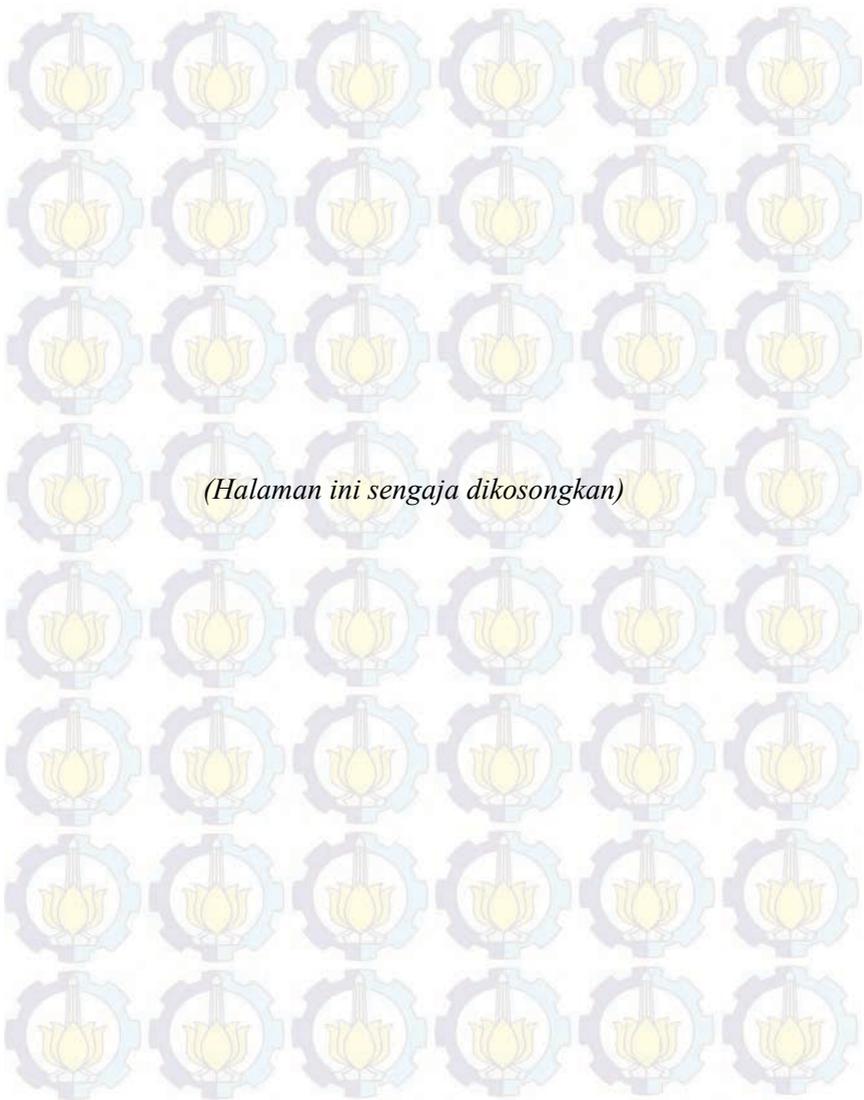
(<http://www.owlnet.rice.edu/~ceng403/co2abs.html>), tanggal akses 21 Maret 2015

BAB V

KESIMPULAN

5.1 Kesimpulan

Dari hasil eksperimen diperoleh harga konstanta Henry untuk absorpsi gas CO_2 dalam larutan K_2CO_3 30% dengan promotor campuran PZ-DEA sebesar 3179,23-4410,41 $\text{kPa}\cdot\text{m}^3/\text{kmol}$ dengan cara analogi gas N_2O . Nilai konstanta Henry yang diperoleh meningkat seiring dengan kenaikan suhu pada range 30-50°C. Pada konsentrasi CO_2 umpan dan promotor yang sama, kenaikan suhu operasi dapat menaikkan tekanan parsial gas CO_2 dalam larutan K_2CO_3 30% dengan promotor PZ-DEA yakni sebesar 517,34-1462,30 Pa. Meningkatnya konsentrasi CO_2 dalam gas umpan dapat meningkatkan besarnya CO_2 loading rata-rata sebesar 11,81% untuk 10% CO_2 umpan dan 36,43% untuk 20% CO_2 umpan. Penggunaan model E-NRTL memberikan hasil dengan *Average Absolute Relative Deviation (AARD)* sebesar 3,38%.



APENDIKS

A.1 Perhitungan Eksperimen

Eksperimen ini dilakukan dengan variabel sebagai berikut:

1. Untuk Sistem K_2CO_3 -(PZ+DEA) :
Suhu (T) = 30 °C, 40 °C, dan 50°C
Kadar K_2CO_3 = 30% massa
Kadar PZ+DEA = 5% massa

Berikut contoh perhitungan dan penabelan hasil perhitungan:

- a. Sebagai contoh perhitungan, diambil suhu 40 °C dengan variabel larutan 30% massa K_2CO_3 dan 1% massa PZ dan 4% massa DEA. Contoh perhitungan sebagai berikut:

Perhitungan massa tiap komponen:

Basis:

Massa larutan ($m_{\text{larutan awal}}$) = 150 g larutan

Dengan komposisi larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\% \text{ massa } K_2CO_3 &= 30\% \\ \% \text{ massa PZ} &= 1\% \\ \% \text{ massa DEA} &= 4\% \\ \% \text{ massa } H_2O &= 100\% - (\% \text{ massa } K_2CO_3 + \% \text{ massa } \\ &\quad \text{PZ} + \% \text{ massa DEA}) \\ &= 100\% - (30\% + 1\% + 4\%) \\ &= 100\% - 35\% = 65\%\end{aligned}$$

Massa tiap-tiap larutan dapat dihitung dengan rumus berikut:

Massa = % massa x $m_{\text{larutan awal}}$

Contoh perhitungan massa K_2CO_3 sebagai berikut:

$$m_{K_2CO_3} = \% \text{ massa } K_2CO_3 \times m_{\text{larutan awal}}$$

$$= 30\% \times 150 \text{ g}$$

$$= 45 \text{ g}$$

Perhitungan massa PZ, massa DEA dan massa H₂O dapat dilihat pada Tabel A.1 berikut:

Tabel A.1 Perhitungan Massa Tiap Komponen

Untuk 1% Massa PZ dan 4% Massa DEA

Senyawa	Komposisi (% Massa)	Massa (gram)	n (mol)	Fraksi mol
K ₂ CO ₃	30	45	0,324	0,05571
PZ	1	1,5	0,018	0,00309
DEA	4	6	0,057	0,00981
H ₂ O	65	97,5	5,417	0,93139
Total	100	150	5,816	1

Menghitung adanya N₂O terabsorb

Untuk menghitung mol N₂O terabsorb, dapat digunakan rumus sebagai berikut:

$$P = 1,01325 \times 10^5 \text{ Pa}$$

$$T = 40 \text{ }^\circ\text{C} = 313,15 \text{ K}$$

$$\text{Volume sampel} : 20 \text{ mL} = 2 \times 10^{-5} \text{ m}^3$$

$$\Delta V \text{ gas} = 10,3 \text{ mL} = 10,3 \times 10^{-6} \text{ m}^3$$

$$\begin{aligned} \text{Volume gas yang terabsorb} &= \text{Volume sampel} - \Delta V \text{ gas} \\ &= 2 \times 10^{-5} - 12 \times 10^{-6} \\ &= 0,0000097 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

Perhitungan konsentrasi kesetimbangan N₂O (C_A^{*})

$$\begin{aligned} \text{mol total gas terabsorp} (n) &= \frac{PV}{RT} \\ &= \frac{1,01325 \times 10^5 \cdot 0,0000097}{8,314 \times 313,15} \\ &= 0,0003775 \text{ mol} \end{aligned}$$

Hasil Perhitungan untuk mol N₂O terabsorb ditunjukkan pada Tabel A.2. dan %DEA pada Tabel A.2.

Tabel A.2 Perhitungan Mol N₂O Terabsorb %PZ dan %DEA

%PZ	%DEA	Suhu (°C)	N ₂ O Terabsorb (mol)
0	5	30	0,0004261
		40	0,0003580
		50	0,0002829
1	4	30	0,0004382
		40	0,0003775
		50	0,0002942
2	3	30	0,0004382
		40	0,0003853
		50	0,0003017
3	2	30	0,0004462
		40	0,0004048
		50	0,0003243

Menghitung Konstanta Henry N₂O Dalam Solvent

- Mol total yang terabsorb (n) = 3,775.10⁻⁷ kmol

$$C_A^* = \frac{\text{mol total gas terlarut}}{\text{Volumeliquid}}$$

$$= \frac{3,775 \cdot 10^{-7}}{20}$$

$$= 0,019 \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$$

- Perhitungan konstanta Henry N₂O dalam larutan K₂CO₃+PZ+DEA

$$P_{H_2O}^v / \text{bar} = 1.33567 \times 10^6 \exp(-5243 / T(K))$$

$$= 7.24547 \text{ kPa}$$

$$\begin{aligned}
 P_{N_2O} &= P_{total} - x_{H_2O} \cdot P^v_{H_2O} - x_{K_2CO_3} P_{K_2CO_3} - x_{solvent} \cdot P_{a\,min\,e} \\
 &= 1,01325 \times 10^5 - (0,93139)(7.24547) - 0 - 0 \\
 &= 94,5758 \text{ kPa}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_A &= \frac{P_A}{C_A^*} \\
 &= \frac{94,5758}{0,019} \\
 &= 5010,5359 \frac{\text{kPa} \cdot \text{m}^3}{\text{kmol}}
 \end{aligned}$$

Menghitung Konstanta Henry CO₂ Dalam Solvent (analogi N₂O)

- Perhitungan konstanta Henry CO₂ dalam air

$$H_{CO_2,water} (\text{kPa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1}) = (2.8249 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2044}{T}\right)$$

- Perhitungan konstanta Henry N₂O dalam air

$$H_{N_2O,water} (\text{kPa} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1}) = (8.5470 \times 10^6) \exp\left(\frac{-2284}{T}\right)$$

- Perhitungan konstanta Henry CO₂ dalam larutan K₂CO₃+PZ+DEA dengan menggunakan rumus analogi N₂O

$$\frac{H_{CO_2,a\,min\,e}}{H_{N_2O,a\,min\,e}} = \frac{H_{CO_2,water}}{H_{N_2O,waer}}$$

Hasil Perhitungan untuk Konstanta Henry (H) tercantum pada Tabel A.3

Tabel A.3 Perhitungan Mol H_{N_2O} dan H_{CO_2} Untuk %PZ dan %DEA

%PZ	%DEA	Suhu (°C)	H_{N_2O} (kPa.m ³ /kmol)	H_{CO_2} (kPa.m ³ /kmol)
0	5	30	4573,0194	3328,9821
		40	5282,6447	3749,5594
		50	6362,8356	4410,4154
1	4	30	4530,3781	3297,9409
		40	5010,5359	3556,4198
		50	6118,5258	4241,0714
2	3	30	4447,3473	3237,4976
		40	4909,5013	3484,7066
		50	5965,9664	4135,3245
3	2	30	4367,3084	3179,2324
		40	4673,6467	3317,2997
		50	5550,1114	3847,0736

- b. Berikut perhitungan menggunakan gas CO_2 Sebagai contoh perhitungan, diambil variabel gas 5% mol CO_2 dengan variabel larutan 30% massa K_2CO_3 dan 1% massa PZ dan 4% massa DEA. Contoh perhitungan sebagai berikut:

Perhitungan volume larutan awal:

Untuk menghitung volume larutan, sebelumnya harus diketahui terlebih dahulu massa dan densitas larutan dan didapatkan data sebagai berikut :

massa piknometer kosong = 13,378 g
 massa piknometer + aquades = 23,4248 g
 massa aquades = (13,5279 - 13,1756) g
 = 10,0467 g
 dengan massa jenis aquades = 1 g/mL

$$\begin{aligned}
 \text{volume piknometer} &= (10,0467 \text{ g}) / (1 \text{ g/mL}) \\
 &= 10,0467 \text{ mL} \\
 \text{massa piknometer + larutan} &= 26,1747 \text{ g} \\
 \text{massa larutan} &= (26,1747 - 13,378) \text{ g} \\
 &= 12,7969 \text{ g} \\
 \text{densitas larutan awal} &= (12,7969 \text{ g}) / (10,0467) \\
 &= 1,2737 \text{ g/mL} \\
 \text{volume larutan awal} &= (150 \text{ g}) / (1,2737 \text{ g/mL}) \\
 &= 117,7663 \text{ mL}
 \end{aligned}$$

Untuk analisa komposisi karbonat dan bikarbonat mula-mula, diambil 10 ml larutan.

Analisa Awal Larutan:

- a. Menganalisa Adanya Bikarbonat (HCO_3^-) Mula-Mula
 Untuk menganalisa adanya bikarbonat (HCO_3^-) mula-mula, dilakukan titrasi dengan menggunakan titran HCl.

Titrasi 1

Volume sampel larutan = 5 mL

Molaritas HCl (M_{HCl}) = 3 M

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

Volume HCl (V_{HCl}) = 5 mL

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) mula-mula dalam 10 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
 \text{Mol } \text{CO}_3^{2-} \text{ mula-mula} &= M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}} \\
 &= 3 \text{ M} \times 5 \text{ mL} \\
 &= 15 \text{ mmol}
 \end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) mula-mula dalam 20 mL larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \text{mol CO}_3^{2-} \text{ mula - mula} &= \frac{15 \text{ mmol} \times 20 \text{ mL}}{5 \text{ mL}} \\ &= 60 \text{ mmol} \\ &= 0,060 \text{ mol} \end{aligned}$$

Titration 2:

$$\text{Volume sampel larutan} = 5 \text{ mL}$$

$$\text{Molaritas HCl (M}_{\text{HCl}}) = 3,015 \text{ M}$$

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

$$\text{Volume HCl (V}_{\text{HCl}}) = 9 \text{ mL}$$

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) mula-mula dalam 10 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \text{Mol HCO}_3^- \text{ mula-mula} &= (\text{M}_{\text{HCl}} \times \text{V}_{\text{HCl}}) - \text{Mol CO}_3^{2-} \text{ mula-mula} \\ &= (3 \text{ M} \times 9 \text{ mL}) - 60 \text{ mmol} \\ &= 12 \text{ mmol} \end{aligned}$$

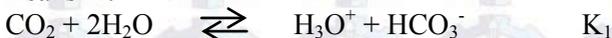
Sehingga dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) dalam 20 ml larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \text{mol HCO}_3^- \text{ mula - mula} &= \frac{12 \text{ mmol} \times 20 \text{ mL}}{5 \text{ mL}} \\ &= 48 \text{ mmol} \\ &= 0,048 \text{ mol} \end{aligned}$$

b. Menghitung Adanya CO_2 Terlarut Mula-Mula

Untuk menghitung mol CO_2 terlarut mula-mula, dapat digunakan rumus konstanta kesetimbangan dari reaksi-reaksi berikut:

Reaksi 1:



Reaksi 2:



Konstanta kesetimbangan masing-masing reaksi dapat dihitung dengan menggunakan persamaan berikut:

$$\ln K_x = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 T + C_4 \ln T$$

(Austgen dan Rochelle tahun 1991)

Konstanta C pada persamaan tersebut juga diperoleh dari Jurnal Austgen dan Rocelle tahun 1991, seperti pada Tabel A.4 berikut:

Tabel A.4 Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan

Keterangan	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄
Reaksi 1	231,465	-12.092,1	-36,7816	0
Reaksi 2	216,049	-12.431,7	-35,4819	0

Sehingga dapat dilakukan perhitungan konstanta kesetimbangan pada masing-masing reaksi kesetimbangan tersebut sebagai berikut :

$$\begin{aligned} \text{Dengan T sistem} &= 40 \text{ }^\circ\text{C} \\ &= (40 \text{ }^\circ\text{C} + 273.15) \text{ K} \\ &= 313,15 \text{ K} \end{aligned}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 1:

$$\begin{aligned} \ln K_1 &= 231,465 + \frac{-12.092,1}{313,15} + (-36,7816 \ln 313,15) + (0 \times 313,15) \\ &= -18,52 \\ K_1 &= 9,04 \cdot 10^{-9} \end{aligned}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 2:

$$\begin{aligned} \ln K_2 &= 216,049 + \frac{-12.431,7}{305,15} + (-35,4819 \ln 305,15) + (0 \times 305,15) \\ &= -27,55 \\ K_2 &= 1,081 \cdot 10^{-12} \end{aligned}$$

Hasil perhitungan konstanta kesetimbangan untuk kedua reaksi tersebut dapat dilihat pada Tabel A.5 berikut:

Tabel A.5 Hasil Perhitungan Konstanta Kestimbangan Pada Analisa Awal Untuk 5% Mol CO₂ pada suhu 40°C

Keterangan	K _x
Reaksi 1	9,04 . 10 ⁻⁹
Reaksi 2	1,081 . 10 ⁻¹²

Perhitungan CO₂ terlarut dapat dihitung dengan persamaan berikut:

$$[CO_2 \text{ terlarut}] = \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]}$$

dengan:

$$\begin{aligned} [HCO_3^-] &= \frac{\text{mol } HCO_3^-}{V_{\text{larutan}}} \\ &= \frac{0,048 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\ &= 2,4 \text{ mol/ml} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [CO_3^{2-}] &= \frac{\text{mol } CO_3^{2-}}{V_{\text{larutan}}} \\ &= \frac{0,06 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\ &= 0,003 \end{aligned}$$

maka:

$$\begin{aligned} [CO_2 \text{ terlarut}] &= \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]} \\ &= \frac{1,081 \cdot 10^{-12} \times 0,00241^2}{9,04 \cdot 10^{-9} \times 0,0030} \\ &= 0,000 \text{ mol/ml} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} CO_2 \text{ terlarut mula-mula} &= [CO_2 \text{ terlarut}] \times V_{\text{larutan}} \\ &= 0 \text{ mol/mL} \times 20 \text{ mL} \\ &= 0 \text{ mol} \end{aligned}$$

Analisa Akhir Larutan:

a. Menganalisa Jumlah Bikarbonat (HCO_3^-) Akhir

Untuk menganalisa jumlah bikarbonat (HCO_3^-) akhir, dilakukan titrasi dengan menggunakan titran HCl.

Titrasi 1:

Volume sampel larutan = 5 mL

Molaritas HCl (M_{HCl}) = 3 M

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

Volume HCl (V_{HCl}) = 6,16 mL

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) akhir dalam 5 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{Mol CO}_3^{2-} \text{ akhir} &= M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}} \\ &= 3 \text{ M} \times 6,16 \text{ mL} \\ &= 18,48 \text{ mmol}\end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol karbonat (CO_3^{2-}) akhir dalam 20 ml larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{mol CO}_3^{2-} \text{ akhir} &= \frac{18,48 \text{ mmol} \times 20 \text{ ml}}{5 \text{ ml}} \\ &= 73,92 \text{ mmol} \\ &= 0,07392 \text{ mol}\end{aligned}$$

Titrasi 2:

Volume sampel larutan = 5 mL

Molaritas HCl (M_{HCl}) = 3 M

Dibutuhkan larutan HCl sebesar:

Volume HCl (V_{HCl}) = 10,04 mL

Dari hasil titrasi tersebut dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) akhir dalam 5 ml sampel larutan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\text{Mol HCO}_3^- \text{ akhir} &= (M_{\text{HCl}} \times V_{\text{HCl}}) - \text{Mol CO}_3^{2-} \text{ akhir} \\ &= (3 \text{ M} \times 10,04 \text{ ml}) - 15,075 \text{ mmol} \\ &= 11,64 \text{ mmol}\end{aligned}$$

Sehingga dapat dihitung mol bikarbonat (HCO_3^-) dalam 20 ml larutan sebagai berikut :

$$\text{mol HCO}_3^- \text{ akhir} = \frac{11,64 \text{ mmol} \times 20 \text{ ml}}{5 \text{ ml}} = 46,56 \text{ mmol} = 0,04656 \text{ mol}$$

b. Menghitung adanya CO_2 terlarut akhir

Untuk menghitung mol CO_2 terlarut akhir, dapat digunakan rumus konstanta kesetimbangan dari reaksi-reaksi berikut:

Reaksi 1:



Reaksi 2:



Konstanta kesetimbangan masing-masing reaksi dapat dihitung dengan menggunakan persamaan berikut :

$$\ln K_x = C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 T + C_4 \ln T$$

(Jurnal Autsgen dan Rocelle tahun 1991)

Konstanta C pada persamaan tersebut juga diperoleh dari Jurnal Autsgen dan Rochelle tahun 1991, seperti pada Tabel A.6 berikut:

Tabel A.6 Nilai Konstanta C pada Persamaan Kesetimbangan

Keterangan	C_1	C_2	C_3	C_4
Reaksi 1	231,465	-12.092,1	-36,7816	0
Reaksi 2	216,049	-12.431,7	-35,4819	0

Sehingga dapat dilakukan perhitungan konstanta kesetimbangan pada masing-masing reaksi kesetimbangan tersebut sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \text{Dengan T sistem} &= 40 \text{ }^\circ\text{C} \\ &= (40 \text{ }^\circ\text{C} + 273.15) \text{ K} \end{aligned}$$

$$= 313,15 \text{ K}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 1:

$$\ln K_1 = 231,465 + \frac{-12.092,1}{313,15} + (-36,7816 \ln 313,15) + (0 \times 313,15)$$

$$= -18,52$$

$$K_1 = 9,04 \cdot 10^{-9}$$

Perhitungan konstanta kesetimbangan reaksi 2:

$$\ln K_2 = 216,049 + \frac{-12.431,7}{313,15} + (-35,4819 \ln 313,15) + (0 \times 313,15)$$

$$= -27,55$$

$$K_2 = 1,081 \cdot 10^{-12}$$

Hasil perhitungan konstanta kesetimbangan untuk kedua reaksi tersebut dapat dilihat pada Tabel A.7 berikut:

Tabel A.7 Hasil Perhitungan Konstanta Kesetimbangan Pada Analisa Akhir Untuk 5% Mol CO₂ pada suhu 40° C

Keterangan	K _x
Reaksi 1	9,04 · 10 ⁻⁹
Reaksi 2	1,081 · 10 ⁻¹²

Perhitungan CO₂ terlarut dapat dihitung dengan persamaan berikut:

$$[CO_2 \text{ terlarut}] = \frac{K_2 [HCO_3^-]^2}{K_1 [CO_3^{2-}]}$$

dengan:

$$[HCO_3^-] = \frac{\text{mol } HCO_3^-}{V_{\text{larutan}}}$$

$$= \frac{0,07392 \text{ mol}}{20 \text{ ml}}$$

$$= 0,003696 \text{ mol/ml}$$

$$\begin{aligned}
 [\text{CO}_3^{2-}] &= \frac{\text{mol CO}_3^{2-}}{V_{\text{larutan}}} \\
 &= \frac{0,04656 \text{ mol}}{20 \text{ ml}} \\
 &= 0,002328 \text{ mol/ml}
 \end{aligned}$$

maka:

$$\begin{aligned}
 [\text{CO}_2 \text{ terlarut}] &= \frac{K_2 [\text{HCO}_3^-]^2}{K_1 [\text{CO}_3^{2-}]} \\
 &= \frac{1,081 \times 10^{-12} \times (0,003696)^2}{9,04 \times 10^{-9} \times 0,002328} \\
 &= 1,753 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mL}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} &= [\text{CO}_2 \text{ terlarut}] \times V_{\text{larutan}} \\
 &= 1,753 \cdot 10^{-7} \text{ mol/mL} \times 20 \text{ mL} \\
 &= 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol}
 \end{aligned}$$

a. Menghitung Mol CO₂ yang bereaksi

Reaksi kesetimbangan yang terjadi:



Berdasarkan reaksi kesetimbangan tersebut, dapat dihitung jumlah mol CO₂ yang bereaksi sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
 \text{Mol CO}_2 \text{ bereaksi} &= \frac{1}{2} \times \text{mol HCO}_3^- \text{ akhir} \\
 &= \frac{1}{2} \cdot 0,04656 \text{ mol} \\
 &= 0,02328 \text{ mol}
 \end{aligned}$$

b. Menghitung Mol CO₂ yang terabsorb

$$\begin{aligned}
 \text{Mol CO}_2 \text{ terabsorb} &= \text{Mol CO}_2 \text{ bereaksi} + \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} \\
 &= 0,02328 \text{ mol} + 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \\
 &= 0,02328 \text{ mol}
 \end{aligned}$$

Menghitung Densitas Larutan:

Untuk menghitung densitas larutan akhir, dilakukan penimbangan massa larutan dengan menggunakan piknometer. Penimbangan tersebut dilakukan sebanyak tiga kali.

Data yang diperoleh sebagai berikut:

Massa pikno dan larutan

$$\text{Massa pikno dan larutan} = 26,2247 \text{ g}$$

Massa larutan

Massa larutan dapat dihitung dengan cara berikut:

$$\begin{aligned} \text{Massa larutan} &= \text{Massa pikno dan larutan} - \text{Massa} \\ \text{pikno kosong} &= 26,2247 \text{ g} - 12,8467 \text{ g} \\ &= 13,378 \text{ g} \end{aligned}$$

Densitas larutan

Densitas larutan dapat dihitung dengan cara berikut:

$$\begin{aligned} \text{Densitas larutan} &= \frac{\text{Massa larutan}}{\text{Volume pikno}} \\ &= \frac{13,378 \text{ g}}{10,0468 \text{ ml}} \\ &= 1,2737 \text{ g/mL} \end{aligned}$$

Menghitung massa tiap-tiap komponen di larutan akhir:

Massa tiap-tiap komponen di larutan akhir dapat dihitung dengan persamaan berikut:

Untuk kalium karbonat (K_2CO_3)

$$\begin{aligned} \text{Mol } \text{K}_2\text{CO}_3 &= \text{Mol } \text{CO}_3^{2-} \\ &= 0,0739 \text{ mol} \end{aligned}$$

$$\text{BM } \text{K}_2\text{CO}_3 = 138 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned} \text{Massa } \text{K}_2\text{CO}_3 &= \text{Mol } \text{K}_2\text{CO}_3 \times \text{BM } \text{K}_2\text{CO}_3 \\ &= 0,0739 \text{ mol} \times 138 \text{ g/mol} \\ &= 10,2 \text{ gram} \end{aligned}$$

Untuk kalium bikarbonat (KHCO₃)

$$\begin{aligned}\text{Mol KHCO}_3 &= \text{Mol HCO}_3^- \\ &= 0,04656 \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\text{BM KHCO}_3 = 100 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned}\text{Massa KHCO}_3 &= \text{Mol KHCO}_3 \times \text{BM KHCO}_3 \\ &= 0,04656 \text{ mol} \times 100 \text{ g/mol} \\ &= 4,66 \text{ gram}\end{aligned}$$

Untuk Methyl diethanolamine (PZ)

$$\text{Massa PZ} = 1,5 \text{ gram}$$

$$\begin{aligned}\text{mol PZ} &= \text{massa PZ} / \text{BM PZ} \\ &= (1,5 \text{ g}) / (86 \text{ g/mol}) \\ &= 0,017 \text{ mol}\end{aligned}$$

Untuk diethanolamine (DEA)

$$\text{Massa DEA} = 6 \text{ g}$$

$$\begin{aligned}\text{mol DEA} &= \text{massa DEA} / \text{BM DEA} \\ &= (6 \text{ g}) / (105 \text{ g/mol}) \\ &= 0,057 \text{ mol}\end{aligned}$$

Untuk gas karbon dioksida (CO₂)

$$\begin{aligned}\text{Mol CO}_2 &= \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} \\ &= 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol}\end{aligned}$$

$$\text{BM CO}_2 = 44 \text{ g/mol}$$

maka:

$$\begin{aligned}\text{Massa CO}_2 &= \text{Mol CO}_2 \times \text{BM CO}_2 \\ &= 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \times 44 \text{ g/mol} \\ &= 1,543 \cdot 10^{-4} \text{ gram}\end{aligned}$$

Untuk Air (H₂O)

$$\begin{aligned}\text{Massa H}_2\text{O} &= \text{Massa larutan akhir} - (\text{Massa K}_2\text{CO}_3 + \\ &\quad \text{Massa KHCO}_3 + \text{Massa PZ} + \text{Massa} \\ &\quad \text{DEA} + \text{Massa CO}_2) \\ &= 9,22 \text{ gram}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Mol H}_2\text{O} &= (9,22 \text{ g}) / (18 \text{ g/mol}) \\ &= 0,51 \text{ mol}\end{aligned}$$

Menghitung mol tiap-tiap komponen di larutan akhir:

Mol tiap-tiap komponen di larutan akhir dapat dihitung dengan persamaan berikut:

Untuk ion karbonat (CO_3^{2-})

Berdasarkan titrasi 1 pada analisa larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol CO}_3^{2-} = 0,0739 \text{ mol}$$

Untuk ion bikarbonat (HCO_3^-)

Berdasarkan titrasi 1 pada analisa larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol HCO}_3^- = 0,04656 \text{ mol}$$

Untuk ion kalium (K^+)

$$\begin{aligned}\text{Mol K}^+ &= (2 \times \text{Mol CO}_3^{2-}) + \text{Mol HCO}_3^- \\ &= (2 \times 0,0739 \text{ mol}) + 0,04656 \text{ mol} \\ &= 0,1478 \text{ mol}\end{aligned}$$

Untuk Piperazine (PZ)

$$\text{Mol PZ} = 0,017 \text{ mol}$$

Untuk diethanolamine (DEA)

$$\text{Mol DEA} = 0,0571 \text{ mol}$$

Untuk gas karbon dioksida (CO_2)

Berdasarkan hasil perhitungan mol CO_2 terlarut, diperoleh:

$$\begin{aligned}\text{Mol CO}_2 &= \text{Mol CO}_2 \text{ terlarut} \\ &= 3,507 \cdot 10^{-6} \text{ mol}\end{aligned}$$

Untuk Air (H_2O)

Berdasarkan hasil perhitungan massa H_2O dalam larutan akhir, diperoleh:

$$\text{Mol H}_2\text{O} = 0,512 \text{ mol}$$

Untuk Larutan

$$\begin{aligned}\text{Mol Larutan akhir} &= (\text{Mol CO}_3^{2-} + \text{Mol HCO}_3^- + \text{Mol K}^+ \\ &\quad + \text{Mol PZ} + \text{Mol DEA} + \text{Mol CO}_2 \\ &\quad + \text{Mol H}_2\text{O}) \\ &= 0,0739 + 0,04656 + 0,1478 + \\ &\quad 0,0174 + 0,0571 + 3,507 \cdot 10^{-6} + 0,512 \\ &= 0,8549 \text{ mol}\end{aligned}$$

Mol dan komposisi tiap-tiap komponen dapat dilihat pada Tabel A.10.

Tabel A.8 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi di Liquid Untuk 5% Mol CO₂ pada suhu 40° C

Komponen	mol	fraksi mol
CO ₃ ²⁻	0,0739	0,0865
HCO ₃ ⁻	0,0466	0,0545
K ⁺	0,1478	0,1729
PZ	0,0174	0,0204
DEA	0,0571	0,0668
CO ₂	3,507,E-06	4,102E-06
H ₂ O	0,5120	0,5989
total	0,8549	1,0000

Menghitung CO₂ Loading:

CO₂ loading dapat dihitung dengan rumus berikut:

$$\begin{aligned}
 \text{CO}_2 \text{ Loading} &= \frac{\text{mol CO}_2 \text{ terabsorb}}{\text{mol K}^+ + \text{mol PZ} + \text{mol DEA}} \\
 &= \frac{0,02328}{0,1478 + 0,0174 + 0,0571} \\
 &= 0,1047
 \end{aligned}$$

Fraksi mol H₂O di gas :

Air di fasa gas dalam keadaan jenuh sehingga,

$$\begin{aligned}
 P_{H_2O} &= P_{H_2O}^{sat} \\
 &= \exp(16.2620 - (3799.89 / ((T - 273.15) + 226.35)))
 \end{aligned}$$

Pada T = 313,15 K

maka,

$$P_{H_2O}^{sat} = 7355,67 \text{ Pa}$$

Menghitung Tekanan Parsial secara Eksperimen pada larutan :

$$\begin{aligned}
 P_{CO_2} &= H_{CO_2} \cdot x_{CO_2} \\
 &= 3556,4198 \frac{kPa \cdot m^3}{kmol} \cdot 3,507 \cdot 10^{-6} kmol \cdot \frac{1}{2 \cdot 10^{-5} m^3} \\
 &= 0,6236139 kPa \\
 &= 623,6139 Pa
 \end{aligned}$$

Berikut penabelan hasil perhitungan komposisi masing-masing komponen di liquid :

Tabel A.9 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas CO₂ 5%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0696	0,0726	0,0727	0,0768	0,0739	0,0786
HCO ₃ ⁻	0,0468	0,0488	0,0466	0,0491	0,0463	0,0493
K ⁺	0,1392	0,1452	0,1454	0,1535	0,1478	0,1572
PZ	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0745	0,0714	0,0754	0,0714	0,0759
CO ₂	3,481 · 10 ⁻⁶	3,6322 · 10 ⁻⁶	3,565 · 10 ⁻⁶	3,763 · 10 ⁻⁶	3,739 · 10 ⁻⁶	3,976 · 10 ⁻⁶
H ₂ O	0,6313	0,6588	0,6112	0,6452	0,6010	0,6390
Total	0,9584	1,0000	0,9474	1,0000	0,9405	1,0000

Tabel A.10 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas CO₂ 5%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0713	0,0821	0,0739	0,0865	0,0746	0,0878
HCO ₃ ⁻	0,0470	0,0542	0,0466	0,0545	0,0463	0,0545
K ⁺	0,1426	0,1642	0,1478	0,1729	0,1493	0,1756
PZ	0,0174	0,0201	0,0174	0,0204	0,0174	0,0205
DEA	0,0571	0,0658	0,0571	0,0668	0,0571	0,0672
CO ₂	3,434.10 ⁻⁶	3,956.10 ⁻⁶	3,507.10 ⁻⁶	4,102.10 ⁻⁶	3,703.10 ⁻⁶	4,356.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5326	0,6136	0,5120	0,5989	0,5053	0,5944
Total	0,8681	1,0000	0,8549	1,0000	0,8501	1,0000

Tabel A.11 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas CO₂ 5%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0737	0,0955	0,0754	0,0984	0,0749	0,0912
HCO ₃ ⁻	0,0470	0,0610	0,0468	0,0611	0,0466	0,0567
K ⁺	0,1474	0,1910	0,1507	0,1968	0,1498	0,1823
PZ	0,0348	0,0451	0,0348	0,0455	0,0348	0,0424
DEA	0,0429	0,0555	0,0429	0,0560	0,0429	0,0522
CO ₂	3,322.10 ⁻⁶	4,306.10 ⁻⁶	3,476.10 ⁻⁶	4,538.10 ⁻⁶	3,729.10 ⁻⁶	4,541.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4258	0,5518	0,4153	0,5423	0,4725	0,5752
Total	0,7715	1,0000	0,7659	1,0000	0,8213	1,0000

Tabel A.12 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas CO₂ 5%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0768	0,1140	0,0787	0,1183	0,0778	0,1159
HCO ₃ ⁻	0,0475	0,0705	0,0470	0,0707	0,0470	0,0701
K ⁺	0,1536	0,2280	0,1574	0,2366	0,1555	0,2317
PZ	0,0522	0,0775	0,0522	0,0785	0,0522	0,0778
DEA	0,0286	0,0424	0,0286	0,0429	0,0286	0,0426
CO ₂	3,252.10 ⁻⁶	4,827.10 ⁻⁶	3,361.10 ⁻⁶	5,052.10 ⁻⁶	3,666.10 ⁻⁶	5,461.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,3151	0,4676	0,3013	0,4528	0,3101	0,4620
Total	0,6738	1,0000	0,6653	1,0000	0,7558	1,0000

Tabel A.13 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di *Liquid* Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas 10%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0648	0,0672	0,0679	0,0712	0,0698	0,0741
HCO ₃ ⁻	0,0504	0,0523	0,0502	0,0526	0,0499	0,0529
K ⁺	0,1296	0,1344	0,1358	0,1425	0,1397	0,1481
PZ	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0741	0,0714	0,0749	0,0714	0,0757
CO ₂	4,336.10 ⁻⁶	4,496.10 ⁻⁶	4,430.10 ⁻⁶	4,646.10 ⁻⁶	4,597.10 ⁻⁶	4,874.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,6481	0,6721	0,6280	0,6587	0,6122	0,6492
Total	0,9644	1,0000	0,9534	1,0000	0,9431	1,0000

Tabel A.14 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas 10%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0665	0,0761	0,0691	0,0803	0,0710	0,0835
HCO ₃ ⁻	0,0506	0,0579	0,0502	0,0583	0,0490	0,0587
K ⁺	0,1330	0,1521	0,1382	0,1606	0,1421	0,1671
PZ	0,0174	0,0199	0,0174	0,0202	0,0174	0,0205
DEA	0,0571	0,0654	0,0571	0,0664	0,0571	0,0672
CO ₂	4,267.10 ⁻⁶	4,882.10 ⁻⁶	4,353.10 ⁻⁶	5,056.10 ⁻⁶	4,519.10 ⁻⁶	5,313.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5494	0,6286	0,5288	0,6143	0,5129	0,6030
Total	0,8741	1,0000	0,8609	1,0000	0,8505	1,0000

Tabel A.15 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas 10%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0689	0,0886	0,0703	0,0910	0,0730	0,0896
HCO ₃ ⁻	0,0506	0,0651	0,0504	0,0652	0,0502	0,0616
K ⁺	0,1378	0,1772	0,1406	0,1819	0,1459	0,1793
PZ	0,0348	0,0448	0,0348	0,0451	0,0348	0,0428
DEA	0,0429	0,0551	0,0429	0,0554	0,0429	0,0527
CO ₂	4,118.10 ⁻⁶	5,297.10 ⁻⁶	4,320.10 ⁻⁶	5,588.10 ⁻⁶	4,442.10 ⁻⁶	5,458.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4426	0,5692	0,4339	0,5614	0,4672	0,5740
Total	0,7775	1,0000	0,7730	1,0000	0,8139	1,0000

Tabel A.16 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas 10%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0715	0,1047	0,0739	0,1101	0,0768	0,1163
HCO ₃ ⁻	0,0509	0,0745	0,0506	0,0754	0,0504	0,0763
K ⁺	0,1430	0,2094	0,1478	0,2202	0,1536	0,2326
PZ	0,0522	0,0765	0,0522	0,0778	0,0522	0,0791
DEA	0,0286	0,0418	0,0286	0,0426	0,0286	0,0433
CO ₂	4,004.10 ⁻⁶	5,861.10 ⁻⁶	4,149.10 ⁻⁶	6,180.10 ⁻⁶	4,261.10 ⁻⁶	6,452.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,3369	0,4922	0,3181	0,4738	0,2988	0,4524
Total	0,6832	1,0000	0,6713	1,0000	0,6604	1,0000

Tabel A.17 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 0% PZ dan 5% DEA Komposisi Gas 20%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0600	0,0612	0,0631	0,0655	0,0650	0,0681
HCO ₃ ⁻	0,0588	0,0600	0,0583	0,0606	0,0581	0,0608
K ⁺	0,1200	0,1224	0,1262	0,1311	0,1301	0,1362
PZ	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
DEA	0,0714	0,0728	0,0714	0,0742	0,0714	0,0748
CO ₂	6,374.10 ⁻⁶	6,501.10 ⁻⁶	6,444.10 ⁻⁶	7690.10 ⁻⁶	6,997.10 ⁻⁶	6,997.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,6703	0,6836	0,6440	0,6687	0,6302	0,6600
Total	0,9805	1,0000	0,9631	1,0000	0,9548	1,0000

Tabel A.18 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 1% PZ dan 4% DEA Komposisi Gas 20%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0617	0,0700	0,0643	0,0739	0,0662	0,0769
HCO ₃ ⁻	0,0590	0,0670	0,0586	0,0673	0,0583	0,0677
K ⁺	0,1234	0,1400	0,1286	0,1478	0,1325	0,1503
PZ	0,0174	0,0198	0,0174	0,0200	0,0174	0,0202
DEA	0,0571	0,0648	0,0571	0,0656	0,0571	0,0663
CO ₂	6,251.10 ⁻⁶	7,092.10 ⁻⁶	6,376.10 ⁻⁶	7,323.10 ⁻⁶	6,615.10 ⁻⁶	7,677.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,5628	0,6385	0,5446	0,6255	0,5300	0,6151
Total	0,8814	1,0000	0,8706	1,0000	0,8616	1,0000

Tabel A.19 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di
Liquid Untuk 2% PZ dan 3% DEA Komposisi Gas 20%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0641	0,0802	0,0655	0,0825	0,0682	0,0886
HCO ₃ ⁻	0,0590	0,0739	0,0588	0,0740	0,0586	0,0761
K ⁺	0,1282	0,1603	0,1310	0,1650	0,1363	0,1771
PZ	0,0348	0,0436	0,0348	0,0439	0,0348	0,0453
DEA	0,0429	0,0536	0,0429	0,0540	0,0429	0,0557
CO ₂	6,017.10 ⁻⁶	7,528.10 ⁻⁶	6,310.10 ⁻⁶	7,946.10 ⁻⁶	6,481.10 ⁻⁶	8,421.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,4703	0,5884	0,4611	0,5806	0,4289	0,5573
Total	0,7993	1,0000	0,7941	1,0000	0,7697	1,0000

Tabel A.20 Hasil Perhitungan Mol dan Komposisi (Fraksi Mol) di Liquid Untuk 3% PZ dan 2% DEA Komposisi Gas 20%

Komponen	30° C		40° C		50° C	
	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol	Mol	Fraksi Mol
CO ₃ ²⁻	0,0667	0,0918	0,0691	0,0997	0,0720	0,1061
HCO ₃ ⁻	0,0593	0,0816	0,0590	0,0851	0,0588	0,0867
K ⁺	0,1334	0,1836	0,1382	0,1993	0,1440	0,2112
PZ	0,0522	0,0719	0,0522	0,0753	0,0522	0,0770
DEA	0,0286	0,0393	0,0286	0,0412	0,0286	0,0421
CO ₂	5,826.10 ⁻⁶	8,018.10 ⁻⁶	6,031.10 ⁻⁶	8,695.10 ⁻⁶	6,186.10 ⁻⁶	9,116.10 ⁻⁶
H ₂ O	0,3864	0,5317	0,3464	0,4994	0,3229	0,4759
Total	0,7266	1,0000	0,6936	1,0000	0,6785	1,0000

A.2 Perhitungan dengan Persamaan Korelasi E-NRTL

Tahap korelasi ini dilakukan untuk menghitung koefisien aktivitas H₂O dan CO₂ dengan menggunakan persamaan model E-NRTL. Persamaan model E-NRTL yang digunakan adalah untuk *molekular species* karena H₂O dan CO₂ berbentuk *molekular species*

Berikut contoh perhitungan dan penabelan hasil perhitungan:

- Sebagai contoh perhitungan, diambil variabel larutan 30% massa K₂CO₃, dengan 1% massa PZ dan 4% massa DEA pada suhu 30°C dengan komposisi gas 10%. Contoh perhitungannya sebagai berikut:

Dari eksperimen diperoleh data komposisi (fraksi mol) tiap-tiap komponen di fase liquid yang dapat dilihat pada Tabel A.14

Menghitung C_i, dimana:

C_i = z_i (jumlah muatan) untuk *ionic species*

Tabel A.21 Hasil Perhitungan C_i Untuk 1% PZ 4% DEA

No.	Spesies	C_i
1.	CO_3^{2-}	-2
2.	HCO_3^-	-1
3.	K^+	1
4.	PZ	1
5.	DEA	1
6.	CO_2	1
7.	H_2O	1

Menghitung X_{i_1} :

Sehingga:

$$\begin{aligned} X_{\text{CO}_2} &= C_{\text{CO}_2} \cdot x_{\text{CO}_2} \\ &= 1 \times 5,056 \cdot 10^{-6} \\ &= 5,056 \cdot 10^{-6} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{H}_2\text{O}} &= C_{\text{H}_2\text{O}} \cdot x_{\text{H}_2\text{O}} \\ &= 1 \times 0,6143 \\ &= 0,6143 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{PZ}} &= C_{\text{PZ}} \cdot x_{\text{PZ}} \\ &= 1 \times 0,0202 \\ &= 0,0202 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{DEA}} &= C_{\text{DEA}} \cdot x_{\text{DEA}} \\ &= 1 \times 0,0664 \\ &= 0,0664 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{K}^+} &= C_{\text{K}^+} \cdot x_{\text{K}^+} \\ &= 1 \times 0,1606 \\ &= 0,1606 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{CO}_3^{2-}} &= C_{\text{CO}_3^{2-}} \cdot x_{\text{CO}_3^{2-}} \\ &= -2 \times 0,0803 \\ &= -0,1606 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_{\text{HCO}_3^-} &= C_{\text{HCO}_3^-} \cdot x_{\text{HCO}_3^-} \\ &= -1 \times 0,0583 \\ &= -0,0583 \end{aligned}$$

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antara Molekul-Pasangan Ion dan Pasangan Ion-Molekul

Menghitung jumlah fraksi komposisi muatan anion, Y_a dan jumlah fraksi komposisi muatan kation, Y_c , sebagai berikut :

Sehingga:

$$Y_{CO_3^{2-}} = \frac{X_{CO_3^{2-}}}{X_{CO_3^{2-}} + X_{HCO_3^-}} = \frac{-0,1606}{-0,1606 + -0,0583} = 0,7338$$

$$Y_{HCO_3^-} = 1 - 0,7338 = 0,2662$$

$$Y_{K^+} = \frac{X_{K^+}}{X_{K^+}} = 1$$

Diketahui *nonrandomness parameter* dari Cullinane (2005):

Tabel A.22 Data *Nonrandomness Parameter*

Interaksi	α	Harga α
Molekul-Molekul	$\alpha_{m,m'}$	0,2
H ₂ O-Pasangan ion	$\alpha_{H_2O,ca}$	0,2
Pasangan ion-H ₂ O	α_{ca,H_2O}	0,2
PZ-Pasangan ion	$\alpha_{PZ,ca}$	0,1
DEA-Pasangan ion	$\alpha_{DEA,ca}$	0,1
CO ₂ - Pasangan ion	$\alpha_{CO_2,ca}$	0,1

Dari hasil fitting diperoleh konstanta *Binary Interaction Parameter* antar molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul seperti pada Tabel A.23 untuk sistem PZ-DEA

Tabel A.23 Data Konstanta *Binary Interaction Parameter* antar Molekul-Pasangan ion dan Pasangan Ion-Molekul untuk Sistem PZ-DEA

interaksi	A	B
H ₂ O-K ⁺ ,CO ₃ ⁼	12,4147	1582,0155
K ⁺ ,CO ₃ ⁼ -H ₂ O	21,8084	-376,9975
H ₂ O-K ⁺ ,HCO ₃ ⁻	14,6031	2862,9845
K ⁺ ,HCO ₃ ⁻ -H ₂ O	-4,3939	-600,8536
CO ₂ -K ⁺ ,CO ₃ ⁼	80,9726	0,0209
K ⁺ ,CO ₃ ⁼ -CO ₂	73,5904	0,0223
CO ₂ -K ⁺ ,HCO ₃ ⁻	28,8741	0,0018
K ⁺ ,HCO ₃ ⁻ -CO ₂	11,2491	0,0090
PZ-K ⁺ ,CO ₃ ⁼	24,1544	0,0051
K ⁺ ,CO ₃ ⁼ -PZ	-0,5691	-0,0028
PZ-K ⁺ ,HCO ₃ ⁻	16,0216	0,0094
K ⁺ ,HCO ₃ ⁻ -PZ	-9,0928	0,0026
DEA-K ⁺ ,CO ₃ ⁼	8,8020	-0,0005
K ⁺ ,CO ₃ ⁼ -DEA	-8,0502	0,0056
DEA-K ⁺ ,HCO ₃ ⁻	13,5856	0,0171
K ⁺ ,HCO ₃ ⁻ -DEA	-4,0565	-0,0066

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO₂:

maka,

molekular

= CO₂

anion

= CO₃⁼,HCO₃⁻

cation

= K⁺

Dari eksperimen didapatkan suhu sistem pada saat terjadi kesetimbangan:

$$T \text{ sistem} = 40^{\circ}\text{C} = 313,15 \text{ K}$$

Rumus yang digunakan untuk menghitung *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul adalah :

Menghitung $\tau_{ca,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi pasangan ion-molekul yaitu $\text{K}^+, \text{CO}_3^{=} - \text{CO}_2$ dengan data sebagai berikut:

$$A = 73,5904 ; \quad B = 0,0223$$

sehingga:

$$\begin{aligned} \tau_{ca,m} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 73,5904 + 0,0223 \left[\frac{1}{313,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 73,590 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi pasangan ion-molekul yaitu $\text{K}^+, \text{HCO}_3^- - \text{CO}_2$ dengan data sebagai berikut:

$$A = 11,2491 ; \quad B = 0,0090$$

Sehingga:

$$\begin{aligned} \tau_{ca,m} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 11,2491 + 0,0090 \left[\frac{1}{313,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 11,249 \end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{m,ca}$

Untuk anion (a) CO₃⁼

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-pasangan ion yaitu CO₂-pasangan ion lain dengan data sebagai berikut:

$$A = 80,9726$$

$$B = 0,0209$$

sehingga:

$$\begin{aligned}\tau_{m,ca} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 80,9726 + 0,0209 \left[\frac{1}{313,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 80,973\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO₃⁻

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-pasangan ion yaitu CO₂-pasangan ion lain dengan data sebagai berikut:

$$A = 28,8741$$

$$B = 0,0018$$

sehingga:

$$\begin{aligned}\tau_{m,ca} &= A + B \left[\frac{1}{T(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 28,8741 + 0,0018 \left[\frac{1}{313,15(K)} - \frac{1}{353,15(K)} \right] \\ &= 28,874\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{m,ca}$

Untuk anion (a) CO₃⁼

$$\begin{aligned}\alpha_{m,ca} &= \alpha_{CO_2,ca} \\ &= 0,1\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{m,ca} &= \alpha_{\text{CO}_2,ca} \\ &= 0,1\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{c,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}\alpha_{c,m} &= \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \\ &= [Y_{\text{CO}_3^{=}} \times \alpha_{m,ca} \text{ (a = CO}_3^{=})] \\ &= 0,072\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{c,m} &= \sum_a Y_a \alpha_{m,ca} \\ &= [Y_{\text{HCO}_3^-} \times \alpha_{m,ca} \text{ (a = HCO}_3^-)] \\ &= 0,028\end{aligned}$$

Menghitung $\alpha_{a,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}\alpha_{a,m} &= \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \\ &= Y_{\text{K}^+} \times \alpha_{m,ca} \\ &= 1 \times 0,1 = 0,1\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\alpha_{a,m} &= \sum_c Y_c \alpha_{m,ca} \\ &= Y_{\text{K}^+} \times \alpha_{m,ca} \\ &= 1 \times 0,1 = 0,1\end{aligned}$$

Menghitung $G_{ca,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\begin{aligned}G_{ca,m} &= \exp(-\alpha_{ca,m} \tau_{ca,m}) \\ &= \exp(-0,072 \times 73,590)\end{aligned}$$

$$= 0,0001$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned} G_{ca,m} &= \exp(-\alpha_{ca,m} \tau_{ca,m}) \\ &= \exp(-0,028 \times 11,249) \\ &= 0,325 \end{aligned}$$

Menghitung $G_{c,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned} G_{c,m} &= \sum_a Y_a G_{ca,m} \\ &= [Y_{\text{CO}_3^{2-}} \times G_{ca,m} \text{ (a = CO}_3^{2-})] \\ &= (0,7338 \times 0,001) \\ &= 0,0007 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned} G_{c,m} &= \sum_a Y_a G_{ca,m} \\ &= [Y_{\text{HCO}_3^-} \times G_{ca,m} \text{ (a = HCO}_3^-)] \\ &= (0,2662 \times 0,325) \\ &= 0,091 \end{aligned}$$

Menghitung $G_{a,m}$

Untuk anion (a) CO_3^{2-}

$$\begin{aligned} G_{a,m} &= \sum_c Y_c G_{ca,m} \\ &= Y_{K^+} \times G_{ca,m} \\ &= 1 \times 0,001 \\ &= 0,001 \end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned} G_{a,m} &= \sum_c Y_c G_{ca,m} \\ &= Y_{K^+} \times G_{ca,m} \end{aligned}$$

$$= 1 \times 0,325$$

$$= 0,325$$

Menghitung $\tau_{c,m}$

$$G = \exp(-\alpha\tau)$$

$$\ln G = -\alpha\tau$$

$$\tau = -\frac{\ln G}{\alpha}$$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\tau_{c,m} = -\frac{\ln G_{c,m}}{\alpha_{c,m}}$$

$$= -\frac{\ln(0,0007)}{0,1}$$

$$= 106,772$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\tau_{c,m} = -\frac{\ln G_{c,m}}{\alpha_{c,m}}$$

$$= -\frac{\ln(0,091)}{0,1}$$

$$= 85,638$$

Menghitung $\tau_{a,m}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$\tau_{a,m} = -\frac{\ln G_{a,m}}{\alpha_{a,m}}$$

$$= -\frac{\ln(0,001)}{0,1}$$

$$= 73,590$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\tau_{a,m} &= -\frac{\ln G_{a,m}}{\alpha_{a,m}} \\ &= -\frac{\ln(0,325)}{0,1} \\ &= 11,249\end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{mc,ac}$

Dari Cullinane (2005):

$$\alpha_{mc,ac} = \alpha_{cm}$$

Untuk anion (a) CO_3^-

$$\begin{aligned}\tau_{mc,ac} &= \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 117,025\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\begin{aligned}\tau_{mc,ac} &= \tau_{cm} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{mc,ac}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 148,585\end{aligned}$$

Menghitung $\tau_{ma,ca}$

Dari Cullinane (2005):

$$\alpha_{ma,ca} = \alpha_{am}$$

Untuk anion (a) CO_3^-

$$\begin{aligned}\tau_{ma,ca} &= \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca}) \\ &= 80,973\end{aligned}$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$\tau_{ma,ca} = \tau_{am} - \frac{\alpha_{ca,m}}{\alpha_{ma,ca}} (\tau_{ca,m} - \tau_{m,ca})$$

$$= 28,874$$

Menghitung $G_{mc,ac}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$G_{mc,ac} = \exp(-\alpha_{cm} \tau_{mc,ac})$$

$$= 0,0002$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$G_{mc,ac} = \exp(-\alpha_{cm} \tau_{mc,ac})$$

$$= 0,016$$

Menghitung $G_{ma,ca}$

Untuk anion (a) $\text{CO}_3^{=}$

$$G_{ma,ca} = \exp(-\alpha_{am} \tau_{ma,ca})$$

$$= 0,0003$$

Untuk anion (a) HCO_3^-

$$G_{ma,ca} = \exp(-\alpha_{am} \tau_{ma,ca})$$

$$= 0,056$$

Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO_2 tersebut dapat dilihat pada Tabel A.24.

Tabel A.24 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:CO₂)

Parameter	m = CO ₂ , c = K+	
	a = CO ₃ ⁻	a = HCO ₃ ⁻
Y _a	0,736	0,264
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	73,590	11,249
τ _{m,ca}	80,973	28,874
α _{ca,m}	0,100	0,100
α _{m,ca}	0,100	0,100
α _{c,m}	0,074	0,026
α _{a,m}	0,100	0,100
G _{ca,m}	0,001	0,325
G _{c,m}	0,0005	0,086
G _{a,m}	0,001	0,325
τ _{c,m}	104,123	93,147
τ _{a,m}	73,590	11,249
τ _{mc,ac}	114,151	159,954
τ _{ma,ca}	80,973	28,874
G _{mc,ac}	0,0002	0,015
G _{ma,ca}	0,0003	0,056

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul H₂O dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul H₂. Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.25.

Tabel A.25 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:H₂O)

Parameter	m = H ₂ O, c = K ⁺	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁼
Y _a	0,736	0,264
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	21,672	-4,611
τ _{m,ca}	12,987	15,639
α _{ca,m}	0,200	0,200
α _{m,ca}	0,200	0,200
α _{c,m}	0,147	0,053
α _{a,m}	0,200	0,200
G _{ca,m}	0,013	2,515
G _{c,m}	0,010	0,663
G _{a,m}	0,013	2,515
τ _{c,m}	31,519	7,775
τ _{a,m}	21,672	-4,611
τ _{mc,ac}	19,721	84,532
τ _{ma,ca}	12,987	15,639
G _{mc,ac}	0,055	0,012
G _{ma,ca}	0,074	0,044

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul DEA dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.26 berikut:

Tabel A.26 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:DEA)

Parameter	m = DEA, c = K+	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻
Ya	0,736	0,264
Yc	1,000	1,000
$\tau_{ca,m}$	-7,151	-5,528
$\tau_{m,ca}$	9,790	15,233
$\alpha_{ca,m}$	0,100	0,100
$\alpha_{m,ca}$	0,100	0,100
$\alpha_{c,m}$	0,074	0,026
$\alpha_{a,m}$	0,100	0,100
G _{ca,m}	2,044	1,738
G _{c,m}	1,505	0,459
G _{a,m}	2,044	1,738
$\tau_{c,m}$	-5,553	29,556
$\tau_{a,m}$	-7,151	-5,528
$\tau_{mc,ac}$	17,459	108,247
$\tau_{ma,ca}$	9,790	15,233
G _{mc,ac}	0,277	0,058
G _{ma,ca}	0,376	0,218

Binary Interaction Parameter antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul PZ dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antara molekul-pasangan ion dan pasangan ion-molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat dilihat pada Tabel A.27

Tabel A.27 Perhitungan *Binary Interaction Parameter*
(Molekul:PZ)

Parameter	m = PZ, c = K+	
	a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁼
Y _a	0,736	0,264
Y _c	1,000	1,000
τ _{ca,m}	-1,016	-7,509
τ _{m,ca}	24,542	18,247
α _{ca,m}	0,100	0,100
α _{m,ca}	0,100	0,100
α _{c,m}	0,074	0,026
α _{a,m}	0,100	0,100
G _{ca,m}	1,107	2,119
G _{c,m}	0,815	0,559
G _{a,m}	1,107	2,119
τ _{c,m}	2,780	22,044
τ _{a,m}	-1,016	-7,509
τ _{mc,ac}	37,497	119,672
τ _{ma,ca}	24,542	18,247
G _{mc,ac}	0,063	0,043
G _{ma,ca}	0,086	0,161

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antar Molekul

Diketahui *Binary interaction parameter* dari hasil fitting seperti pada Tabel A.28.

Tabel A.28 Data Konstanta *Binary Interaction Parameter* antar Molekul

Interaksi	A	B
CO ₂ -H ₂ O	48,792	-8428,918
H ₂ O-CO ₂	-2,772	1080,043
H ₂ O-PZ	-9,311	-0,026
PZ-H ₂ O	-1,773	-0,040
PZ-CO ₂	5,198	0,021
CO ₂ -PZ	0,000	0,000
H ₂ O-DEA	-7,696	1317,608
DEA-H ₂ O	0,916	-718,126
DEA-CO ₂	12,905	0,025
CO ₂ -DEA	-0,568	-0,001
DEA-PZ	-0,755	-0,002
PZ-DEA	-4,776	-0,016

Menghitung *Binary Interaction Parameter* antar molekul untuk molekul CO₂:

molekular = CO₂, H₂O, PZ dan DEA

Dari eksperimen didapatkan suhu sistem pada saat terjadi kesetimbangan:

$$\begin{aligned} T \text{ sistem} &= 40^{\circ}\text{C} \\ &= (40^{\circ}\text{C} + 273,15) \text{ K} \\ &= 313,15 \text{ K} \end{aligned}$$

Rumus yang digunakan untuk menghitung *Binary Interaction Parameter* antar molekul adalah :

Menghitung $\tau_{m,m'}$

Untuk m' CO₂

Binary Interaction Parameter antar molekul CO₂- CO₂:

$$\tau_{m,m'} = 0$$

Untuk m' H₂O, m' PZ, m' DEA

Konstanta *Binary Interaction Parameter* yang digunakan adalah konstanta interaksi molekul-molekul yaitu CO₂- H₂O, CO₂- PZ, CO₂-DEA dengan persamaan berikut:

$$\tau_{m,m'} = A + \frac{B}{T(K)}$$

Menghitung $\alpha_{m,m'}$

Untuk m' CO₂

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- CO₂:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' H₂O

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- H₂O:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' PZ

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- PZ:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Untuk m' DEA

Nonrandomness parameter antar molekul CO₂- DEA:

$$\alpha_{m,m'} = 0,2$$

Menghitung G_{m,m'}

Untuk m' CO₂, m' H₂O, m' PZ, m' DEA

$$G_{m,m'} = \exp(-\alpha_{m,m'}\tau_{m,m'})$$

Binary Interaction Parameter antar molekul untuk molekul H₂O, PZ dan DEA dapat dihitung dengan cara yang sama seperti Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antar molekul untuk molekul CO₂. Perhitungan tersebut dapat ditabelkan sebagai berikut:

Tabel A.29 Perhitungan *Binary Interaction Parameter* antar Molekul

m	m' = CO ₂		m' = H ₂ O		m' = DEA		m' =PZ	
	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'	τ m,m'	G m,m'
H ₂ O	0,000	1,000	0,791	0,854	-3,350	1,954	-9,311	6,438
CO ₂	20,987	0,015	0,000	1,000	-0,568	1,120	0,000	1,000
DEA	-1,453	1,337	12,905	0,076	0,000	1,000	-0,755	1,163
PZ	-1,773	1,426	5,198	0,354	-4,776	2,599	0,000	1,000

Menghitung Koefisien Aktivitas H₂O dan CO₂

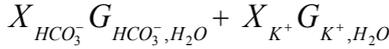
Perhitungan koefisien aktivitas H₂O dan CO₂ sebagai berikut :

Menghitung $\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}$

$$\begin{aligned} \sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm} = & X_{CO_2} G_{CO_2, H_2O} \tau_{CO_2, H_2O} + X_{H_2O} G_{H_2O, H_2O} \tau_{H_2O, H_2O} \\ & + X_{PZ} G_{PZ, H_2O} \tau_{PZ, H_2O} + \\ & X_{DEA} G_{DEA, H_2O} \tau_{DEA, H_2O} + \\ & X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, H_2O} \tau_{CO_3^{2-}, H_2O} + \\ & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, H_2O} \tau_{HCO_3^-, H_2O} \\ & + X_{K^+} G_{K^+, H_2O} \tau_{K^+, H_2O} \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km}$

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km} = & X_{CO_2} G_{CO_2, H_2O} + X_{H_2O} G_{H_2O, H_2O} + X_{PZ} G_{PZ, H_2O} + \\ & X_{DEA} G_{DEA, H_2O} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, H_2O} + \end{aligned}$$



Menghitung $\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}}$

Untuk m' = CO₂

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{CO_2} G_{H_2O, CO_2}}{X_{CO_2} G_{CO_2, CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O, CO_2} + X_{PZ} G_{PZ, CO_2} + X_{DEA} G_{DEA, CO_2} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, CO_2} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, CO_2} + X_{K^+} G_{K^+, CO_2}}$$

Untuk m' = PZ

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{PZ} G_{H_2O, PZ}}{X_{CO_2} G_{CO_2, PZ} + X_{H_2O} G_{H_2O, PZ} + X_{PZ} G_{PZ, PZ} + X_{DEA} G_{DEA, PZ} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-}, PZ} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-, PZ} + X_{K^+} G_{K^+, PZ}}$$

Untuk m' = DEA

$$\sum_{m'} \frac{X_{m'} G_{mm'}}{\sum_k X_k G_{km'}} = \frac{X_{DEA} G_{H_2O, DEA}}{X_{CO_2} G_{CO_2, DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O, DEA} + X_{PZ} G_{PZ, DEA}}$$

$$\frac{+ X_{DEA} G_{DEA,DEA} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},DEA}}{+ X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,DEA} + X_{K^+} G_{K^+,DEA}}$$

Menghitung $\tau_{m,m'}$

Untuk $m' = CO_2$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,CO_2}$$

Untuk $m' = PZ$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,PZ}$$

Untuk $m' = DEA$

$$\tau_{m,m'} = \tau_{H_2O,DEA}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}$

Untuk $m' = CO_2$

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2,CO_2} \tau_{CO_2,CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O,CO_2} \tau_{H_2O,CO_2} + \\ & X_{PZ} G_{PZ,CO_2} \tau_{PZ,CO_2} + X_{DEA} G_{DEA,CO_2} \tau_{DEA,CO_2} + \\ & X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},CO_2} \tau_{CO_3^{2-},CO_2} + \\ & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,CO_2} \tau_{HCO_3^-,CO_2} + X_{K^+} G_{K^+,CO_2} \tau_{K^+,CO_2} \end{aligned}$$

Untuk $m' = PZ$

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2,PZ} \tau_{CO_2,PZ} + X_{H_2O} G_{H_2O,PZ} \tau_{H_2O,PZ} + \\ & X_{PZ} G_{PZ,PZ} \tau_{PZ,MDEA} + X_{DEA} G_{DEA,PZ} \tau_{DEA,PZ} + \end{aligned}$$

$$X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},PZ} \tau_{CO_3^{2-},PZ} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,PZ} \tau_{HCO_3^-,PZ} + X_{K^+} G_{K^+,PZ} \tau_{K^+,PZ}$$

Untuk m' = DEA

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2,DEA} \tau_{CO_2,DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O,DEA} \tau_{H_2O,DEA} + \\ & X_{PZ} G_{PZ,DEA} \tau_{PZ,DEA} + \\ & X_{DEA} G_{DEA,DEA} \tau_{DEA,DEA} + \\ & X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},DEA} \tau_{CO_3^{2-},DEA} + \\ & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,DEA} \tau_{HCO_3^-,DEA} + \\ & X_{K^+} G_{K^+,DEA} \tau_{K^+,DEA} \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{km'}$

Untuk m' = CO₂

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2,CO_2} + X_{H_2O} G_{H_2O,CO_2} + X_{PZ} G_{PZ,CO_2} + \\ & X_{DEA} G_{DEA,CO_2} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},CO_2} + \\ & X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,CO_2} + X_{K^+} G_{K^+,CO_2} \end{aligned}$$

Untuk m' = PZ

$$\begin{aligned} \sum_k X_k G_{km'} = & X_{CO_2} G_{CO_2,PZ} + X_{H_2O} G_{H_2O,PZ} + X_{PZ} G_{PZ,PZ} + \\ & X_{DEA} G_{DEA,PZ} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},PZ} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,PZ} + \\ & X_{K^+} G_{K^+,PZ} \end{aligned}$$

Untuk m' = DEA

$$\sum_k X_k G_{km'} = X_{CO_2} G_{CO_2,DEA} + X_{H_2O} G_{H_2O,DEA} + X_{PZ} G_{PZ,DEA} + X_{DEA} G_{DEA,DEA} + X_{CO_3^{2-}} G_{CO_3^{2-},DEA} + X_{HCO_3^-} G_{HCO_3^-,DEA} + X_{K^+} G_{K^+,DEA}$$

Menghitung $\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}}$

Untuk a = CO₃²⁻

$$\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}} = \frac{Y_{CO_3^{2-}} X_{K^+} G_{H_2O-K^+,CO_3^{2-}-K^+}}{X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-},CO_3^{2-}-K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-},CO_3^{2-}-K^+} + X_{PZ} G_{PZ-CO_3^{2-},CO_3^{2-}-K^+} + X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-},CO_3^{2-}-K^+}}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_c \sum_a \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}} = \frac{Y_{HCO_3^-} X_{K^+} G_{H_2O-K^+,HCO_3^- -K^+}}{X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-,HCO_3^- -K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-,HCO_3^- -K^+} + X_{PZ} G_{PZ-HCO_3^-,HCO_3^- -K^+} + X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-,HCO_3^- -K^+}}$$

Menghitung $\tau_{mc,ac}$

Untuk a = CO₃²⁻

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{H_2O-K^+,CO_3^{2-}-K^+}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\tau_{mc,ac} = \tau_{H_2O-K^+,HCO_3^- -K^+}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}$

Untuk a = CO₃²⁻

$$\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac} = X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{CO_2-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

$$X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

$$X_{PZ} G_{PZ-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{PZ-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

$$X_{DEA} G_{DEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+} \tau_{DEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac} = X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, HCO_3^-K^+} \tau_{CO_2-K^+, HCO_3^-K^+} +$$

$$X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, HCO_3^-K^+} \tau_{H_2O-K^+, HCO_3^-K^+} +$$

$$X_{PZ} G_{PZ-K^+, HCO_3^-K^+} \tau_{PZ-K^+, HCO_3^-K^+} +$$

$$X_{DEA} G_{DEA-K^+, HCO_3^-K^+} \tau_{DEA-K^+, HCO_3^-K^+}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{kc,ac}$

Untuk a = CO₃⁼

$$\sum_k X_k G_{kc,ac} = X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, CO_3^{2-}-K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

$$X_{PZ} G_{PZ-K^+, CO_3^{2-}-K^+} + X_{DEA} G_{DEA-K^+, CO_3^{2-}-K^+} +$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_k X_k G_{kc,ac} = X_{CO_2} G_{CO_2-K^+, HCO_3^-K^+} + X_{H_2O} G_{H_2O-K^+, HCO_3^-K^+} +$$

$$X_{PZ} G_{PZ-K^+, HCO_3^-K^+} + X_{DEA} G_{DEA-K^+, HCO_3^-K^+} +$$

Menghitung $\sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}}$

Untuk a = CO₃⁼

$$\sum_a \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}} = \frac{Y_{K^+} X_{CO_3^{2-}} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}}{X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}}$$

$$\begin{aligned}
 & + X_{PZ} G_{PZ-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \\
 \text{Untuk } a = HCO_3^- & \\
 \sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{a} = & \frac{Y_{K^+} X_{HCO_3^-} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}}{X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}} \\
 & + X_{PZ} G_{PZ-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}
 \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}$

Untuk a = CO₃²⁻

$$\begin{aligned}
 \sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca} = & X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \tau_{CO_2-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + \\
 & X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \tau_{H_2O-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + \\
 & X_{PZ} G_{PZ-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \tau_{PZ-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} + \\
 & X_{DEA} G_{DEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}} \tau_{DEA-CO_3^{2-}, K^+-CO_3^{2-}}
 \end{aligned}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\begin{aligned}
 \sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca} = & X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{CO_2-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\
 & X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{H_2O-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\
 & X_{PZ} G_{PZ-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{PZ-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} + \\
 & X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-} \tau_{DEA-HCO_3^-, K^+-HCO_3^-}
 \end{aligned}$$

Menghitung $\sum_k X_k G_{ka,ca}$

Untuk a = CO₃²⁻

$$\sum_k X_k G_{ka,ca} = X_{CO_2} G_{CO_2-CO_3^-,K^+-CO_3^-} + X_{H_2O} G_{H_2O-CO_3^-,K^+-CO_3^-} + X_{PZ} G_{PZ-CO_3^-,K^+-CO_3^-} + X_{DEA} G_{DEA-CO_3^-,K^+-CO_3^-}$$

Untuk a = HCO₃⁻

$$\sum_k X_k G_{ka,ca} = X_{CO_2} G_{CO_2-HCO_3^-,K^+-HCO_3^-} + X_{PZ} G_{PZ-HCO_3^-,K^+-HCO_3^-} + X_{H_2O} G_{H_2O-HCO_3^-,K^+-HCO_3^-} + X_{DEA} G_{DEA-HCO_3^-,K^+-HCO_3^-}$$

Perhitungan koefisien aktivitas H₂O dapat dilihat pada Tabel A.30 dan untuk perhitungan koefisien aktivitas CO₂ dapat dilihat pada Tabel A.31.

Tabel A.30 Perhitungan Koefisien Aktivitas H₂O

No.	Persamaan E-NRTL	Hasil Perhitungan		
		m' = CO ₂	m' = DEA	m' = DEA
1a	$\sum_j X_j G_{jm} \tau_{jm}$	0,660		
1b	$\sum_k X_k G_{km}$	0,515		
1c	1a / 1c	1,283		
		m' = CO ₂	m' = DEA	m' = DEA
2a	$\frac{\sum X_{m'} G_{mm'}}{m' \sum_k X_k G_{km'}}$	8,46E-06	0,1060325	0,0825
2b	$\tau m, m'$	1,605	0,404	-8,649
2c	$\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}$	0,390	2,297	-25,7561
2d	$\sum_k X_k G_{km'} \tau_{km'}$	19,424	0,482	3,080263
2e	$2a \left(2b - \frac{2c}{2d} \right)$	-0,226	-0,042388	1,4E-01
2f	Jumlah 2e	-0,268		
		a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻	-

Tabel A.31 Perhitungan Koefisien Aktivitas H₂O (lanjutan)

No.	Persamaan E-NRTL	Hasil Perhitungan		
3a	$\sum_c \frac{Y_a X_c G_{mc,ac}}{\sum_k X_k G_{ka,ac}}$	0,000	0,000	-
3b	$\tau_{mc,ac}$	114,151	159,954	-
3c	$\sum_k X_k G_{kc,ac} \tau_{kc,ac}$	0,013	1,123	-
3d	$\sum_k X_k G_{kc,ac}$	0,049	1,16E-02	-
3e	$3a \left(3b - \frac{3c}{3d} \right)$	0,051	0,015	-
3f	Jumlah 3e	0,067		
		a = CO ₃ ⁼	a = HCO ₃ ⁻	-
4a	$\sum_c \frac{Y_c X_a G_{ma,ca}}{\sum_k X_k G_{ka,ca}}$	-0,001	-0,083	-
4b	$\tau_{ma,ca}$	80,973	28,874	-
4c	$\sum_k X_k G_{ka,ca} \tau_{ka,ca}$	0,8	0,701	-
4d	$\sum_k X_k G_{ka,ca}$	0,1	0,044	-
4e	$4a \left(4b - \frac{4c}{4d} \right)$	-0,057	-1,068	-
4f	Jumlah 4e	-1,125		
5	$\ln \gamma_{H_2O}^{lc} = 1c + 2f + 3f + 4f$	-0,511		
6	$\ln \gamma_{H_2O}^{PHD} = \ln \gamma_{H_2O}^{Born} = 0$	0,000		
7	γ_{H_2O}	0,600		
8	P_{H_2O}	773,67		



(Halaman ini sengaja dikosongkan)