



SKRIPSI – TK141581

**PENGUKURAN KESETIMBANGAN UAP-CAIR SISTEM
BINER ETANOL (1) + EUGENOL (2) PADA BERBAGAI
TEKANAN**

Oleh :

Aldarina Galfanora

NRP. 02211440000023

Nisrina Huttı

NRP. 02211440000154

Dosen Pembimbing

Prof. Dr. Ir. Kuswandi, DEA

NIP. 1958 06 12 1984 03 1003

Annas Wiguno, ST.,MT

NIP. 1989 11 25 2015 04 1001

DEPARTEMEN TEKNIK KIMIA

FAKULTAS TEKNOLOGI INDUSTRI

INSTITUT TEKNOLOGI SEPULUH NOPEMBER

SURABAYA

2018



FINAL PROJECT - TK141581

MEASUREMENT OF VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA FOR BINARY SYSTEM ETHANOL (1) + EUGENOL (2) AT VARIOUS PRESSURES

By :

Aldarina Galfanora

NRP. 0221144000023

Nisrina Huttı

NRP. 02211440000154

Advisors

Prof. Dr. Ir. Kuswandi, DEA

NIP.1958 06 12 1984 03 1003

Annas Wiguno, ST.,MT

NIP. 1989 11 25 2015 04 1001

**DEPARTMENT OF CHEMICAL ENGINEERING
FACULTY OF INDUSTRIAL TECHNOLOGY
INSTITUT TEKNOLOGI SEPULUH NOPEMBER
SURABAYA
2018**

LEMBAR PENGESAHAN

PENGUKURAN KESETIMBANGAN UAP-CAIR SISTEM BINER ETANOL(1) + EUGENOL(2) PADA BERBAGAI TEKANAN

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat memperoleh gelar
Sarjana Teknik Kimia pada Program Studi S-1
Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknologi Industri
Institut Teknologi Sepuluh Nopember Surabaya

Oleh:

Aldarina Galfanora **02211440000023**

Nisrina Huttii **02211440000154**

Disetujui Oleh Tim Penguji Tugas Akhir :

1. Prof. Dr. Ir. Kuswandi, DEA
(Pembimbing I)
2. Annas Wiguno, ST., MT.
(Pembimbing II)
3. Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M.Eng.
(Penguji I)
4. Dr. Siti Machmudah, S. T., M. Eng.
(Penguji II)
5. Rizky Tetrisyanda, ST., MT.
(Penguji III)

C. a - g
M
J
R
R



PENGUKURAN KESETIMBANGAN UAP-CAIR SISTEM BINER ETANOL + EUGENOL PADA BERBAGAI TEKANAN

Nama : 1. Aldarina Galfanora (02211440000023)
2. Nisrina Huttii (02211440000154)

Departemen : Teknik Kimia FTI-ITS

Pembimbing : 1. Prof. Dr. Ir. Kuswandi, DEA.
2. Annas Wiguno, S.T., M.T

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan data kesetimbangan uap-cair sistem biner etanol (1)+eugenol(2) pada tekanan 400 mmHg dan atmosfer. Data yang diperoleh dikorelasikan dengan persamaan NRTL dan UNIQUAC. Peralatan percobaan yang digunakan pada penelitian ini adalah peralatan *Othmer Still*. Peralatan telah divalidasi dengan cara mengukur suhu uap etanol murni dan membandingkan hasil suhu uap dari persamaan Antoine. Percobaan dilakukan dengan memanaskan larutan etanol(1)+eugenol(2) dalam *boiler* pada *Othmer Still* dengan komposisi tertentu. Percobaan dilakukan dalam kondisi sesuai dengan variabel tekanan yang ditentukan. Proses pemanasan ini terus berulang hingga sistem mencapai kondisi kesetimbangan yang ditandai oleh suhu konstan di dalam *boiler*. Selanjutnya sampel fase cair dan uap dianalisa dengan refraktometer guna mengetahui komposisinya. Data percobaan kesetimbangan uap cair sistem biner etanol(1)+eugenol(2) dapat dikorelasikan dengan model NRTL dan UNIQUAC dengan *Absolute Average Relative Deviation* (AARD) maksimal pada T dan y_1 masing-masing sebesar 7,525 % dan 2,69 %. Selain itu juga dilakukan prediksi kesetimbangan uap-cair sistem biner etanol (1) + eugenol(2) menggunakan UNIFAC yang menghasilkan AARD maksimal pada T dan y_1 masing-masing sebesar 9,261 % dan 1,742 %

Kata kunci : Etanol, Eugenol, Kesetimbangan Uap-Cair, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

MEASUREMENT OF VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA FOR BINARY SYSTEM ETHANOL + EUGENOL AT VARIOUS PRESSURES

**Name : 1. Aldarina Galfanora (02211440000023)
2. Nisrina Huttii (02211440000154)**

Departement : Chemical Engineering FTI-ITS

**Advisors : 1. Prof. Dr. Ir. Kuswandi, DEA.
2. Annas Wiguno, S.T., M.T**

ABSTRACT

The objective of this research was to measure vapor-liquid equilibrium data for binary systems ethanol (1)+eugenol (2) at 400 mmHg and atmosphere. The experimental data were correlated using NRTL and UNIQUAC equations. The experimental apparatus used in this experiment was Othmer Still. The validation of experimental apparatus were done by measuring the vapor temperature of a pure ethanol, and comparing the results of vapor temperature with the Antoine equation. The experiment was carried out by heating ethanol (1)+eugenol (2) in a boiler with a certain composition. The experiments were conducted under conditions according to the specified pressure variables. This heating process keeps repeating until the system reaches an equilibrium condition which characterized by constant temperature inside the boiler. Then the samples of liquid and vapor were going to be analyzed with a refractometer to know its composition. The experimental data vapor-liquid equilibria for binary systems ethanol (1)+eugenol (2) can correlated using NRTL and UNIQUAC equations with the maximal value of Absolute Average Relative Deviation (AARD) for T and y_1 7,525 % and 2,69 % respectively. Therefore the prediction of vapor-liquid equilibria for binary systems ethanol (1) + eugenol (2) using UNIFAC resulted the maxiaml value of AARD for T and y_1 9.261% and 1.742% respectively

Keywords: Ethanol, Eugenol, Vapor-Liquid Equilibria, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadirat Allah SWT atas berkat dan rahmat serta hidayah-Nya sehingga kami dapat menyelesaikan laporan skripsi dengan judul, “Pengukuran Kesetimbangan Uap - Cair Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) Pada Berbagai Tekanan”. Dimana laporan skripsi ini merupakan syarat dalam menyelesaikan pendidikan sarjana di Departemen Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember Surabaya.

Kami menyadari dengan keterbatasan yang kami miliki tentunya laporan ini tidak akan terwujud tanpa adanya bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, oleh karena itu dengan kerendahan hati pada kesempatan ini kami mengucapkan terima kasih kepada :

1. Bapak Prof. Dr. Ir. Kuswandi, DEA sebagai dosen pembimbing pertama yang senantiasa memberi bimbingan dan saran.
2. Bapak Annas Wiguno, ST.,MT sebagai dosen pembimbing kedua yang senantiasa memberi bimbingan dan saran.
3. Bapak Prof. Dr. Ir. Gede Wibawa, M. Eng selaku Kepala Laboratorium Thermodinamika Departemen Teknik Kimia FTI ITS.

4. Bapak dan Ibu Dosen pengajar serta seluruh karyawan Departemen Teknik Kimia ITS
5. Orang tua serta saudara-saudara kami atas doa, dukungan dan bimbingan, perhatian dan kasih sayang yang selalu tercurah selama ini.
6. Teman-teman dari Laboratorium Thermodinamika yang telah membantu dan menemani kami dalam suka maupun duka dalam proses pembuatan tugas akhir ini.
7. Serta teman-teman angkatan 2014 atas dukungan yang diberikan.

Akhir kata, laporan ini masih jauh dari sempurna. Oleh karena itu, Penulis mengharapkan masukan, kritik, dan saran dari setiap pembaca laporan ini. Penulis berharap nantinya laporan ini dapat bermanfaat bagi setiap pembaca.

Surabaya, Juli 2018

Penyusun

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN.....	iv
ABSTRAK.....	vii
ABSTRACT	iii
KATA PENGANTAR	xi
DAFTAR ISI.....	xiii
DAFTAR TABEL.....	xv
DAFTAR GAMBAR	xvi
BAB I PENDAHULUAN	I-1
I.1 Latar Belakang	I-1
I.2 Rumusan Masalah.....	I-3
I.3 Tujuan Penelitian	I-3
I.4 Manfaat Penelitian	I-3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	II-1
II.1 Tinjauan Penelitian.....	II-1
II.2 Distilasi Vakum.....	II-1
II.3 Etanol.....	II-2
II.4 Eugenol.....	II-3
II.5 Kesetimbangan Uap Cair.....	II-4
II.6 Persamaan Koefisien Aktivitas.....	II-7
II.6.1 Persamaan NRTL.....	II-7
II.6.2 Persamaan UNIQUAC.....	II-8
II.7 Metode UNIFAC.....	II-10
II.8 Tes Konsistensi Thermodinamika	II-11
II.9 Root Mean Square Deviation (RMSD)	II-14
II.10 Bubble T	II-14
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	III-1
III.1 Peralatan Percobaan	III-1
III.2 Bahan Percobaan.....	III-3
III.3 Variabel Percobaan	III-3
III.4 Prosedur Percobaan.....	III-3
III.5 Algoritma Metodologi Penelitian.....	III-4
III.5.1 Algoritma Metode Penelitian.....	III-4

III.5.2 Algoritma Perhitungan Korelasi dengan Persamaan NRTL.....	III-4
III.5.3 Algoritma Perhitungan Korelasi dengan Persamaan UNIQUAC.....	III-5
III.5.4 Algoritma Perhitungan Kesetimbangan Uap - Cair	III-6
III.5.5 Algoritma Perhitungan Koefisien Aktivitas Kesetimbangan Uap-Cair menggunakan Persamaan UNIFAC	III-7
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	IV-1
IV.1 Validasi Alat	IV-1
IV.2 Kurva Kalibrasi Refraktometer	IV-2
IV.3 Data Eksperimen dan Tes Konsistensi Termodinamika	IV-3
IV.4 Korelasi Kesetimbangan Uap-Cair Etanol (1) + Eugenol.....	IV-6
IV.5 Prediksi Kesetimbangan Uap-Cair Etanol (1) + Eugenol.....	IV-10
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	V-1
V.1 Kesimpulan.....	V-1
V.2 Saran.....	V-1
DAFTAR PUSTAKA	ix
DAFTAR NOTASI	xii
APENDIKS	A-1
LAMPIRAN	

DAFTAR TABEL

- Tabel I. 1 Standar Mutu Minyak Cengkeh SNI 06-2387-2006I-1
- Tabel II. 1 Properties EtanolII-2
- Tabel II. 2 Properties EugenolII-3
- Tabel IV.1 Hasil Validasi Alat dengan Korelasi terhadap Persamaan AntoineIV-2
- Tabel IV.2 Data Analisa Eksperimen Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) pada Tekanan 400 mmHgIV-4
- Tabel IV.3 Data Analisa Eksperimen Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol pada Tekanan AtmosferIV-4
- Tabel IV. 4 Metode Luasan Ekspansi Persamaan Redlich Kister dan HerringtonIV-6
- Tabel IV. 5 Korelasi Parameter NRTL dan UNIQUAC terhadap AARD Suhu dan Komposisi Uap Sistem BinerIV-8
- Tabel IV. 7 UNIFAC *Group Identification*IV-10
- Tabel IV. 8 Deviasi Hasil Prediksi UNIFACIV-11

DAFTAR GAMBAR

- Gambar II. 1 Struktur Bangun EtanolIII-2
- Gambar II. 2 Struktur Bangun EugenolII-3
- Gambar II. 3 Kurva Luasan Tes KonsistensiII-13
- Gambar III. 1 Peralatan Othmer StillIII-2
- Gambar IV. 1 Grafik Tekanan Uap Etanol berdasarkan Eksperimen Terhadap Persamaan Antoine dari LiteraturIV-2
- Gambar IV. 2 Kurva Kalibrasi Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) dengan Analisa RefraktometerIV-3
- Gambar IV. 3 Grafik Konsistensi Sistem Etanol (1) + Eugenol pada Tekanan 400 mmHgIV-5
- Gambar IV. 4 Grafik Konsistensi Sistem Etanol (1) +Eugenol pada Tekanan AtmosferIV-5
- Gambar IV. 5 Grafik $T-x_1-y_1$ pada Kesetimbangan Uap – Cair Etanol (1) + Eugenol (2)
pada Tekanan 400 mmHgIV-9
- Gambar IV. 6 Grafik $T-x_1-y_1$ pada Kesetimbangan Uap – Cair Etanol (1) + Eugenol (2)
pada Tekanan AtmosferIV-9
- Gambar IV. 7 Prediksi UNIFAC pada Berbagai TekananIV-11

BAB I

PENDAHULUAN

I.1 Latar Belakang

Tanaman cengkeh (*Eugenia aromaticum*) merupakan salah satu tanaman perkebunan asli Indonesia yang sering digunakan sebagai bahan baku rokok kretek khas Indonesia. Menurut Nurdjannah (2004), cengkeh (*Syzygium aromaticum*, syn. *Eugenia aromaticum*), yang dalam bahasa Inggris disebut *cloves*, adalah tangkai bunga kering dari famili *Myrtaceae*. Cengkeh menghasilkan minyak atsiri yang bermanfaat sebagai bahan baku dalam industri farmasi maupun industri makanan .

Menurut Nurdjannah (2004) pohon cengkeh memiliki bau yang khas yang berasal dari minyak atsiri yang terdapat bunga (10-20%), gagang (5- 10%) dan daun (1-4%). Komponen terbesar yang terdapat dalam minyak atsiri cengkeh adalah eugenol sebesar 70-80%. Komponen terbanyak kedua setelah eugenol adalah β -caryophillene,selain itu juga mengandung aseton-eugenol, beberapa senyawa dari kelompok seskuiterpen serta bahan-bahan yang tidak mudah menguap seperti tanin, lilin, dan bahan serupa damar (Pratiwi, dkk. 2016). Untuk standar mutu minyak cengkeh disajikan pada Tabel I. 1

Tabel I. 1 Standar Mutu Minyak Cengkeh SNI 06-2387-2006

Karakteristik	Persyaratan
Warna	Kuning-coklat tua
Bau	Khas minyak cengkeh
Bobot Jenis 20°C/20°C	1,025-1,049
Indeks Bias ($n_{D_{20}}$)	1,528-1,535
Kelarutan dalam etanol 70%	1:2 jernih
Eugenol total, %,v/v	Min. 78
β -caryophillene %,v/v	Maks. 17

Eugenol adalah komponen utama minyak cengkeh berupa cairan tidak berwarna, beraroma khas dan mempunyai rasa pedas yang banyak digunakan diindustri *fragrance* dan *flavor* karena memiliki aroma yang khas dan dimanfaatkan juga dalam industri farmasi karena bersifat antiseptik.

Eugenol merupakan senyawa yang banyak digunakan sebagai campuran bahan pewangi seperti parfum dan deodoran. Turunan dari eugenol yang diproses lebih lanjut dibutuhkan dalam industri farmasi, penyedap, parfum, dan *flavor* antara lain adalah isoeugenol, metil eugenol, dan vanili sintetis. Eugenol yang diproses menjadi bermacam-macam produk yang lebih berguna dapat dijual kembali dengan harga yang lebih tinggi, sehingga diperoleh nilai tambah dan keuntungan yang tidak sedikit. Pemanfaatan minyak daun cengkeh di Indonesia masih terbatas pada pemenuhan kebutuhan ekspor. Minyak cengkeh yang diekspor saat ini berupa bahan mentah dan sebagian juga diekspor sebagai senyawa eugenol (Busroni, 2000).

Menurut standar *United States Pharmacopeia* (USP), untuk dapat diperdagangkan di pasar internasional, eugenol harus memiliki tingkat kemurnian lebih besar dari 98%. Peningkatan kadar kemurnian eugenol akan menyebabkan harga jual minyak cengkeh menjadi semakin tinggi.

Untuk mendapatkan minyak cengkeh dilakukan proses ekstraksi dari tanaman cengkeh, selanjutnya hasil minyak cengkeh tersebut mengandung eugenol dan zat lain seperti β -*caryophillene*.

Untuk mendapatkan eugenol dengan kemurnian tinggi dari minyak cengkeh terdapat 2 cara yang dapat digunakan yakni distilasi dan ekstraksi. Permurnian eugenol secara konvensional umumnya menggunakan distilasi namun bisa juga menggunakan ekstraksi sebab suhu operasi distilasi yang tinggi dapat menyebabkan terdegradasinya minyak. Resin dapat terbentuk selama proses pengolahan minyak menggunakan tekanan dan suhu tinggi. Resin yang terbentuk sukar larut sehingga membentuk dispersi dan menyebabkan daun cengkeh menjadi

keruh. Warna dalam minyak atsiri sangat mempengaruhi mutu, penggunaan, dan harga. Minyak yang keruh dan bewarna gelap mempunyai mutu yang rendah. Perubahan warna minyak kearah yang lebih gelap disebabkan oleh degradasi warna akibat reaksi oksidasi ataupun polimerisasi senyawa-senyawa penyusun minyak dan akibatnya residu yang terkandung dalam minyak tersebut dapat mempercepat kerusakan minyak (Hutajulu,2007)

Pada proses ekstraksi, pemilihan pelarut harus mempertimbangkan sifat dan karakteristiknya seperti polar, non polar, volatilitas, dan toksinitas. Penggunaan alkohol sebagai pelarut untuk ekstraksi memiliki beberapa keunggulan, diantaranya alkohol memiliki kelarutan yang tinggi dalam air, tidak beracun, meningkatkan aroma pada campuran reaksi oksidasi direduksi dengan adanya alkohol, pelarut alkohol bersifat selektif yaitu dapat melarutkan eugenol (Chafer dkk, 2005).

Setelah proses ekstraksi cair-cair eugenol dari minyak cengkeh menggunakan pelarut etanol selanjutnya dilakukan pemurnian eugenol dalam etanol melalui metode distilasi. Pada distilasi eugenol, suhu yang digunakan tidak boleh terlalu tinggi, karena dapat merusak eugenol yang mengakibatkan minyak yang dihasilkan akan memiliki aroma yang tidak sedap. Untuk mengatasi hal ini, digunakan proses distilasi dalam keadaan vakum agar suhu operasi dapat diturunkan. Keadaan vakum menyebabkan terjadinya penurunan suhu didih suatu larutan yang disebabkan oleh turunnya tekanan, sehingga kerusakan eugenol dapat sedikit dihindari (Pratiwi, dkk. 2016).

Untuk melakukan proses distilasi vakum diperlukan data kesetimbangan uap cair yang mana digunakan untuk merancang kolom distilasi. Dengan adanya data kesetimbangan ini maka diharapkan dapat menjadi dasar perancangan kolom distilasi sehingga di kemudian hari Indonesia dapat menciptakan teknologi berdaya saing tinggi untuk mengolah minyak cengkeh menjadi senyawa turunannya untuk memenuhi kebutuhan industri dalam negeri.

Adapun data kesetimbangan uap-cair sistem biner etanol-eugenol pada tekanan vakum maupun atmosfer yang diperoleh dari eksperimen belum tersedia sehingga perlu dilakukan penelitian untuk menentukan data-data kesetimbangan uap-cair sistem biner pada tekanan tersebut yang hasilnya dapat digunakan sebagai dasar dalam perancangan kolom distilasi.

I.2 Rumusan Masalah

Belum adanya data kesetimbangan uap-cair untuk sistem biner etanol-eugenol pada tekanan tertentu.

I.3 Tujuan Penelitian

1. Mendapatkan data kesetimbangan uap-cair sistem biner etanol (1) + eugenol (2) pada tekanan 400 mmHg dan tekanan atmosfer
2. Mengkorelasikan data eksperimen dengan model NRTL dan UNIQUAC
3. Memprediksi data kesetimbangan dengan model UNIFAC

I.4 Manfaat Penelitian

Manfaat yang dapat diperoleh dari penelitian ini adalah mendapatkan data kesetimbangan uap-cair sistem biner etanol-eugenol yang dapat dijadikan sebagai acuan pada perancangan kolom distilasi minyak atsiri pada dunia industri.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

II.1 Tinjauan Penelitian

Berikut ini merupakan beberapa penelitian yang pernah dilakukan diantaranya yaitu:

1. Kuswandi dan Naryono (2011) melakukan eksperimen untuk kesetimbangan cair- cair sistem Eugenol + Etanol +Air pada temperature 303,15 ; 313,15 dan 323,15 K,
2. Rahman dkk (2013) melakukan eksperimen untuk kesetimbangan uap-cair sistem biner etanol + 2-butanol dan aseton + 2-butanol pada tekanan 101,33 kPa.
3. Wang dkk (2013) melakukan eksperimen untuk kesetimbangan uap-cair isobarik pinane, dihydromycerene (DHM) dan dihydromyrcenol (DMHOH) pada tekanan 6 kPa

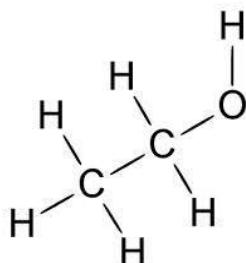
II.2 Distilasi Vakum

Distilasi adalah suatu proses yang bertujuan memisahkan suatu campuran liquida yang tercampur dan mudah menguap menjadi komponen – komponennya. Syarat pemisahan yaitu komposisi uapnya harus berbeda dengan komposisi liquidnya pada saat terjadi kesetimbangan (Geankoplis, 1983).

Proses distilasi dapat dilakukan pada tekanan vakum, atau yang biasa disebut sebagai distilasi vakum. Distilasi vakum biasanya digunakan jika senyawa yang ingin didistilasi tidak stabil, dengan pengertian dapat terdekomposisi sebelum atau mendekati titik didihnya atau campuran yang memiliki titik didih di atas 150°C. Untuk mengurangi tekanan digunakan pompa vakum yang berfungsi sebagai penurun tekanan pada sistem destilasi ini. Dengan menggunakan tekanan vakum, titik didih dapat diturunkan dan distilasi dapat berlangsung tanpa mengakibatkan terjadinya dekomposisi. Titik didih dapat didefinisikan sebagai suhu pada tekanan tertentu, dimana cairan akan berubah menjadi uap (Fahmi dkk, 2014).

II.3 Etanol

Alkohol adalah senyawa hidrokarbon berupa gugus hydroksil (-OH) dengan 2 atom karbon (C). Spesies alkohol yang banyak digunakan adalah CH₃CH₂OH yang disebut metil alkohol (metanol), C₂H₅OH yang diberi nama etil alkohol (etanol), dan C₃H₇OH yang disebut isopropil alkohol (IPA) atau propanol. Dalam dunia perdagangan yang disebut alkohol adalah etanol atau etil alkohol atau metil karbinol dengan rumus kimia C₂H₅OH (Rama, 2008). Etanol disebut juga etil alkohol dengan rumus kimia C₂H₅OH atau CH₃CH₂OH dengan titik didihnya 78,4° C. Etanol memiliki sifat tidak berwarna, volatil dan dapat bercampur dengan air (Kartika dkk., 1997). Ada 2 jenis etanol menurut Rama (2008), etanol sintetik sering disebut metanol atau metil alkohol atau alkohol kayu, terbuat dari etilen, salah satu derivat minyak bumi atau batu bara. Bahan ini diperoleh dari sintesis kimia yang disebut hidrasi, sedangkan bioetanol direkayasa dari biomassa (tanaman) melalui proses biologi (enzimatik dan fermentasi). Struktur bangun etanol yang terdiri dari C, H, dan O dapat dilihat pada Gambar II.1.



Gambar II. 1 Struktur Bangun Etanol

Sedangkan properties seperti titik didih dan titik leleh etanol murni dapat dilihat pada Tabel II.1

Tabel II. 1 Properties Etanol

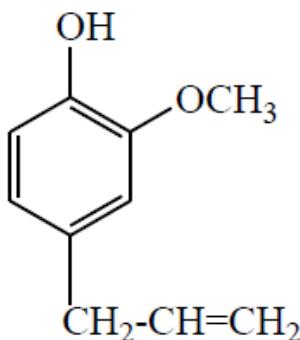
Berat molekul	46.07 g/mol
---------------	-------------

Rumus molekul	C ₉ H ₁₀ O
Titik leleh	-114°C
Titik didih	78.37 °C
Densitas	789 kg/m ³
Tekanan uap	43 mmHg at 20°C

II.4 Eugenol

Eugenol merupakan suatu senyawa yang memiliki rumus molekul C₁₀H₁₂O₂. Senyawa ini memiliki beberapa gugus fungsional yaitu alil (-CH₂-CH=CH₂), fenol (-OH), dan metoksi (-OCH₃). Senyawa ini berbentuk cairan berwarna bening hingga kuning pucat, dengan aroma menyegarkan dan pedas seperti bunga cengkeh kering.

Senyawa eugenol merupakan komponen utama yang terkandung dalam minyak cengkeh (*Syzygium aromaticum*), dengan kandungan dapat mencapai 70-96%, minyak cengkeh juga mengandung komponen lain seperti eugenol asetat dan β-caryophyllene. Senyawa ini dipakai dalam berbagai industri, seperti industri farmasi, kosmetika, makanan dan minuman, rokok, pestisida nabati, perikanan, pertambangan, kemasan aktif dan industri kimia lainnya (Towaha, 2012). Struktur bangun eugenol dapat dilihat pada Gambar II.2



Gambar II. 2 Struktur Bangun Eugenol

Beberapa *properties* eugenol (NIST 2017) disajikan pada Tabel II.2.

Tabel II. 2 *Properties* Eugenol

Berat molekul	164,204 g/mole
Rumus molekul	C ₁₀ H ₁₂ O ₂
Titik leleh	-9.2 °C
Titik didih	253,89 °C at 760 mmHg
Densitas	1,0652 gm/cm ³ at 20 °C
Tekanan uap	0,0221 mmHg at 25 °C

II.5 Kesetimbangan Uap Cair

Apabila sebuah campuran zat cair pada suhu dan tekanan tertentu berada dalam kesetimbangan dengan campuran uap pada suhu dan tekanan yang sama, maka sistem tersebut tidak mengalami perubahan pada skala makroskopis. Pada saat setimbang, potensial kimia masing-masing komponen pada setiap

fase memiliki nilai yang sama, dan energi bebas Gibbs total mencapai nilai minimum.

Potensial kimia setiap komponen dapat dinyatakan sebagai fugasitas (f), dimana pada kesetimbangan dapat dirumuskan sebagai berikut :

$$\hat{f}_i^V = \hat{f}_i^L \quad (2.1)$$

Dengan V = untuk fase uap

L = untuk fase liquid

Untuk fase uap dengan fraksi mol y , hubungan antara fugasitas dengan suhu, tekanan dan fraksi mol, dan koefisien fugasitas dapat dinyatakan dengan persamaan :

$$\hat{f}_i^V = y_i \hat{\phi}_i P \quad (2.2)$$

Fugasitas komponen i dalam fase cair tergantung pada komposisi fase yang bersangkutan serta koefisien aktivitas γ yang dapat dinyatakan dengan persamaan:

$$\hat{f}_i^L = \gamma_i x_i f_i^0 \quad (2.3)$$

Dengan harga f_i^0 sama dengan

$$f_i^0 = P_i^{sat} \phi_i^{sat} \exp\left(\frac{V_i(P - P_i^{sat})}{RT}\right) \quad (2.4)$$

Bentuk eksponensial pada persamaan (2.4) disebut sebagai faktor Poynting. Untuk tekanan rendah, bentuk eksponensial pada persamaan (2.4) mendekati 1 dan pada tekanan rendah, ϕ_i dianggap 1 sehingga :

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

Dari Persamaan (2.2) dan (2.5) didapatkan persamaan :

$$y_i P = P_i^{sat} \gamma_i x_i \quad (2.6)$$

Persamaan (2.6) merupakan syarat kesetimbangan untuk kondisi tekanan rendah.

Pada keadaan setimbang, $P^V = P^L$ dan $T^V = T^L$ dengan koefisien aktivitas untuk komponen i di larutan :

$$\gamma_i = \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i^0} \quad (2.7)$$

koefisien aktivitas juga dapat dinyatakan dengan persamaan :

$$\gamma_i = \frac{y_i P}{x_i P_i^{sat}} \quad (2.8)$$

Pada Persamaan Gibbs Duhem dinyatakan bahwa di dalam suatu campuran, koefisien aktivitas tiap komponennya tidak bebas terhadap yang lain melainkan terhubung melalui Persamaan Diferensial.

Persamaan Umum Gibbs Duhem :

$$\left[\frac{\partial M}{\partial P} \right]_{T,x} dP + \left[\frac{\partial M}{\partial T} \right]_{P,x} dT - \sum_i x_i d\bar{M}_i = 0 \quad (2.9)$$

Pada P dan T konstan, maka :

$$\sum_i x_i d\bar{M}_i = 0 \quad (2.10)$$

Jika $\ln \gamma_i$ adalah properti parsial, maka Persamaan (2.10) menjadi :

$$\sum x_i d\ln \gamma_i = 0 \quad (2.11)$$

Maka diperoleh hubungan Persamaan Gibbs Duhem untuk sistem biner sebagai berikut :

$$x_1 \left[\frac{\partial \ln \gamma_1}{\partial x_1} \right]_{T,P} = x_2 \left[\frac{\partial \ln \gamma_2}{\partial x_2} \right]_{T,P} \quad (2.12)$$

Agar suatu data mudah diolah maka harganya relatif terhadap suatu keadaan ideal dengan excess properti yaitu perbedaan antara harga nyata dan harga idealnya, dimana :

$$M^E = M - M^{id} \quad (2.13)$$

$$nG^E = nG^{id} \quad (2.14)$$

Penggunaan Persamaan Gibbs Duhem paling baik dilakukan melalui konsep kelebihan energi Gibbs (excess energi Gibbs), yaitu energi Gibbs teramat pada suatu campuran yang diatas atau lebih besar untuk larutan ideal pada suhu, tekanan dan komposisi yang sama.

Total kelebihan energi Gibbs G^E untuk larutan biner, mengandung n_1 mol komponen 1 dan n_2 mol komponen 2 definisikan dengan :

$$G^E = RT(n_1 \ln \gamma_1 - n_2 \ln \gamma_2) \quad (2.15)$$

Pada Persamaan Gibbs Duhem kita dapat menghubungkan koefisien aktifitas tiap komponen γ_1 dan γ_2 dengan G^E melalui diferensiasi :

$$RT \ln \gamma_1 = \left[\frac{\partial G^E}{\partial n_1} \right]_{T,P,n_2} \quad (2.16)$$

$$RT \ln \gamma_2 = \left[\frac{\partial G^E}{\partial n_2} \right]_{T,P,n_1} \quad (2.17)$$

Persamaan untuk mencari konstanta kesetimbangannya adalah

$$K_1 = \frac{y_1}{x_1} \qquad \qquad K_2 = \frac{y_2}{x_2} \quad (2.18)$$

Dimana

$$K_i = \frac{\gamma_i P^{sat}}{\hat{\phi}_i P} \qquad \qquad (i = 1, 2, 3 \dots N) \quad (2.19)$$

dengan asumsi gas ideal, maka harga $\phi = 1$ dan persamaan menjadi :

$$K_i = \frac{\gamma_i P^{sat}}{P} \quad (2.20)$$

(Van Ness, 2001)

II.6 Persamaan Koefisien Aktivitas

Model energi Gibbs seperti NRTL dan UNIQUAC sering digunakan untuk korelasi VLE campuran non-ideal seperti alkohol-hidrokarbon. Model ini membutuhkan parameter interaksi biner tiap pasangan antar molekulnya (*pair*). Ini digunakan untuk problem campuran multi komponen.

II.6.1 Persamaan NRTL

Persamaan NRTL (Non Random Two Liquid) dikemukakan oleh Renon dan Prauznitz (1968). Persamaan ini diturunkan berdasarkan konsep *local composition* yang dipelopori oleh Wilson. Persamaan NRTL ini dapat digunakan untuk sistem yang larut sebagian maupun yang larut sempurna. Persamaan ini dapat dipakai secara luas dalam VLE, LLE, dan VLLE untuk berbagai jenis zat, misalnya campuran hidrokarbon jenuh dan spesies polar, campuran senyawa non-polar, campuran spesies non-polar dan polar, campuran air dan spesies polar, dan campuran alkohol dengan campuran spesies non-polar.

Persamaan NRTL untuk sistem biner dinyatakan dengan

$$\frac{G^E}{RT} = x_1 x_2 \left(\frac{\tau_{21} G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} + \frac{\tau_{12} G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)$$

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[\tau_{21} \left[\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right]^2 + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right]$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[\tau_{21} \left[\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right]^2 + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right]$$

$$\ln G_{12} = -\alpha_{12} \tau_{12}$$

$$\ln G_{21} = -\alpha_{12} \tau_{21}$$

$$\tau_{12} = \frac{\alpha_{12}}{RT}$$

$$\tau_{21} = \frac{\alpha_{21}}{RT}$$

Persamaan koefisien aktifitas untuk sistem biner dan multikomponen lain dapat diturunkan dari persamaan dasarnya :

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^n \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^n G_{ki} \cdot x_k} + \sum_{j=1}^n \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^n G_{kj} \cdot x_k} \left[\tau_{ij} - \sum_{k=1}^n \frac{x_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_{k=1}^n G_{kj} \cdot x_k} \right]$$

Keuntungan menggunakan persamaan NRTL ditunjukkan dengan pengalaman bahwa persamaan NRTL memiliki keandalan

yang konsisten dibanding Van Laar dan Margules dalam arti persamaan ini biasanya dapat menangani keadaan-keadaan yang sangat tidak ideal, hanya dengan dua atau tiga parameter yang dapat disesuaikan. Persamaan NRTL sesuai untuk sistem multikomponen.

II.6.2 Persamaan UNIQUAC

Persamaan UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical) dikemukakan oleh Abrams dan Prausnitz (1975). Persamaan ini pada dasarnya merupakan kelanjutan dari teori quansi-chemical dari Guggenheim untuk campuran *non-random* yang diaplikasikan untuk larutan yang mengandung molekul-molekul yang memiliki ukuran yang berbeda. Persamaan ini juga dapat digunakan untuk sistem cair yang larut sempurna maupun sebagian. Persamaan ini dapat diaplikasikan untuk campuran cair non-elektrolit, baik polar maupun non-polar, seperti hidrokarbon, alkohol, nitril, keton, aldehid, dan sebagainya.

Persamaan UNIQUAC dipisahkan menjadi dua bagian yaitu bagian kombinatorial yang terdiri dari parameter komponen murni saja untuk menghitung perbedaan bentuk dan ukuran molekul, serta bagian residual yang menggabungkan dua parameter biner tiap pasang molekul untuk menghitung interaksi molekul

$$g = g^c + g^R$$

Untuk sistem multikomponen

$$g^c = \sum_i x_i \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \sum_i q_i x_i \ln \frac{\Theta_i}{\Phi_i}$$

$$g^R = - \sum_i q_i x_i \ln \left(\sum_j \Theta_j \tau_{ji} \right)$$

Dimana i,j,k = 1,2,3, ..., N (komponen)

$$\Theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j}$$

$$\Phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j}$$

$$\tau_{ji} = \exp\left(-\frac{(u_{ji} - u_{ii})}{RT}\right)$$

Dimana $u_{ii} = u_{jj} = u_{kk} = 0$

$u_{ji} = u_{ji}$

Dan $z=10$ (ditetapkan)

Koefisien aktivitas untuk sembarang komponen i dinyatakan sebagai berikut

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^R$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left(1 - \ln s_i - \sum_j \theta_j \frac{\tau_{ij}}{s_j} \right)$$

$$J_i = \frac{r_i}{\sum_j r_j x_j}$$

$$L_i = \frac{q_i}{\sum_j q_j x_j}$$

$$S_i = \sum_l \theta_l \tau_{li}$$

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1)$$

Model UNIQUAC dapat diterapkan untuk memprediksi kesetimbangan uap-cair sistem multi komponen dengan parameter energi interaksi sistem biner. Keuntungan menggunakan persamaan UNIQUAC adalah hanya mempunyai dua parameter yang dapat disesuaikan, mempunyai ketergantungan yang lebih kecil terhadap suhu, dan dapat diterapkan pada larutan dengan molekul-molekul yang besar atau kecil sebab variabel konsentrasi primer merupakan fraksi permukaan dan bukan fraksi mol.

II.7 Metode UNIFAC

Metode UNIFAC pertama kali dikemukakan oleh Fredenslund *et al* (1975). Persamaan tersebut dipisahkan menjadi dua bagian yaitu bagian kombinasi yang terdiri dari parameter komponen murni saja untuk menghitung perbedaan bentuk dan ukuran molekul, serta bagian residual untuk menghitung interaksi antar molekul.

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (2.41)$$

Bagian kombinasi $\ln \gamma_i^C$ dapat dihitung menggunakan persamaan di bawah ini, dimana identik dengan model UNIQUAC sebagai berikut:

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (2.42)$$

$$\text{Dimana: } l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (2.43)$$

$$z=10 \quad (2.44)$$

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (2.45)$$

$$\phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j}$$

Pada persamaan di atas x_i merupakan fraksi mol komponen i, sedangkan θ_i dan ϕ_i merupakan fraksi area dan fraksi volume secara berturut-turut. Dan untuk komponen murni parameter r_i dan q_i secara berturut-turut menunjukkan volume molecular dan luas permukaan van der Waals.

$$r_i = \sum_k v_k^{(1)} R_k \quad (2.47)$$

$$q_i = \sum_k v_k^{(1)} Q_k \quad (2.48)$$

Dimana $v_k^{(1)}$ selaku bilangan bulat yang menunjukkan jumlah grup type k dalam suatu molekul i. R_k dan Q_k lebih lengkap tersedia dalam Tabel 8.23 pada buku polling.

Untuk bagian residual $\ln \gamma_i^R$ dapat dihitung dengan menggunakan persamaan di bawah ini:

$$\ln \gamma_i^R = \sum_k v_k^{(i)} \left(\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(1)} \right) \quad (2.49)$$

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \frac{\theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \theta_n \Psi_{nm}} \right] \quad (2.50)$$

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n} \quad (2.51)$$

$$X_m = \frac{\sum_j v_m^{(j)} x_j}{\sum_j \sum_n v_n^{(j)} x_j} \quad (2.52)$$

$$\Psi_{mn} = \exp \left(-\frac{a_{mn}}{T} \right) \quad (2.53)$$

II.8 Tes Konsistensi Thermodinamika

Data percobaan yang diperoleh dari penelitian tidak bisa langsung diolah tetapi harus dipastikan terlebih dahulu bahwa data percobaan tersebut akurat secara thermoinamika. Untuk data percobaan kesetimbangan uap cair sistem biner atau multi komponen keakuratannya diuji dengan Persamaan Gibbs-Duhem. Uji keakuratan data hasil percobaan secara thermodinamika dilakukan dengan cara koreksi terhadap Gibbs-Duhem untuk melihat seberapa besar penyimpangannya terhadap persamaan tersebut.

Secara umum penurunan dari Persamaan Gibbs-Duhem yang digunakan untuk menghitung konsistensi data.

$$\partial \ln \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) = x_1 \frac{d \ln \gamma_1^*}{dx_1} + x_2 \frac{d \ln \gamma_2^*}{dx_1} \quad (2.54)$$

Dimana : γ = koefisien aktifitas dari Persamaan Gibbs-Duhem

γ^* = koefisien aktifitas dari data percobaan

Jika suku kanan dari persamaan tersebut bernilai nol atau suatu harga yang dapat ditoleransi penyimpangannya dari nol maka data dinyatakan konsisten. Sedangkan suku kiri dari persamaan di atas digunakan untuk mengukur secara langsung penyimpangan terhadap Persamaan Gibbs-Duhem. Terdapat banyak sekali penggunaan metode uji konsistensi dalam termodinamika seperti metode tes luasan (integral), metode diferensial, *infinite dilution test*, dan sebagainya.

Tahun 1951 Herrington mengusulkan metode tes luasan yang didasarkan pada Persamaan Gibbs-Duhem untuk sistem biner :

$$G^E = RT(x_1 \ln \gamma_1 + x_2 \ln \gamma_2) \quad (2.55)$$

Jika dideferensialkan terhadap x_1 maka :

$$\frac{dG^E}{RT} = dx_1 \left(\frac{x_1 d \ln \gamma_1}{dx_1} + \frac{x_2 d \ln \gamma_1}{dx_1} + \ln \gamma_2 \frac{dx_2}{dx_1} \right) \quad (2.56)$$

Dimana : $dx_2 = dx_1$

$$d\left(\frac{G^E}{RT}\right) = dx_1 \left(\frac{x_1 d \ln \gamma_1}{dx_1} + \ln \gamma_1 + \frac{x_2 d \ln \gamma_2}{dx_1} - \ln \gamma_2 \right) \quad (2.57)$$

$$\text{dan } x_1 \frac{d \ln \gamma_1}{dx_1} + x_2 \frac{d \ln \gamma_2}{dx_2} = 0 \quad (2.58)$$

maka

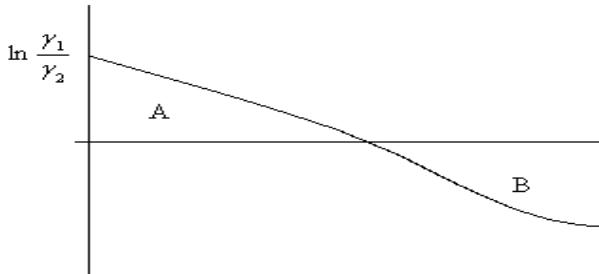
$$d\left(\frac{G^E}{RT}\right) = \ln\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) dx_1 \quad (2.59)$$

dengan mengintegralkan persamaan diatas dengan batas $x_1 = 0$ sampai dengan $x_1 = 1$

$$\int_{x_1=0}^{x_1=1} \ln\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) dx_1 = \left(\frac{G^E}{RT}\right)_{x_1=1} - \left(\frac{G^E}{RT}\right)_{x_1=0} \quad (2.60)$$

Koefisien aktivitas $\gamma_1 = 1$ untuk komponen murni ($x_1 = 1$) dan sebaliknya $\ln \gamma_1$ akan mendekati suatu harga limit tertentu yang dilambangkan dengan γ_1^∞ untuk $x_1 = 0$, sehingga menjadi :

$$\int_{x_1=0}^{x_1=1} \ln\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) dx_1 = 0 \quad (2.61)$$



Gambar II. 3 Kurva Luasan Tes Konsistensi

Pada Gambar II.3 di atas, dapat dilihat plot antara $\ln(\gamma_1/\gamma_2)$ korelasi terhadap x_1 percobaan. dimana luas daerah di atas sumbu x_1 (A) dan luas daerah di bawah sumbu x_1 (B) harus sama. Setelah diplot, parameter persamaan Redlich-Kister yang paling mendekati distribusi data yang telah diplot tersebut dicari nilai-nilai absolut selisih luasan (Philip dkk, 1994). Persamaan Redlich-Kister yang digunakan sebagai berikut :

$$\ln \left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right) = a + b(x_2 - x_1) + c(6x_2x_1 - 1) + d(x_2 - x_1)(1 - 8x_2x_1) \quad (2.62)$$

$$\frac{G^E}{RT} = x_1x_2[B + C(x_1 - x_2) + D(x_1 - x_2)^2 + E(x_1 - x_2)^2] \quad (2.63)$$

Karena adanya kesalahan dalam pengukuran Jamie Wisniak (Wisniak, 1994) mendidefinisikan harga deviasi sebagai :

$$D = 100\% \left| \frac{A - B}{A + B} \right| \quad (2.64)$$

Terkadang harga entalpi campuran tidak tersedia maka oleh Herington diberikan :

$$J = 150\% \frac{|T_{\max} - T_{\min}|}{T_{\min}} \quad (2.65)$$

T_{\min} = titik didih terendah pada sistem isobar dalam range $x_1 = 0$ sampai $x_1 = 1$

T_{\max} = titik didih tertinggi pada sistem isobar dalam range $x_1 = 0$ sampai $x_1 = 1$

Konstanta 150 diperoleh dari analisa data panas campuran cairan organik.

$$|D - J| < 10 \quad (2.66)$$

Bila telah memenuhi Persamaan (2.66) berarti data telah konsisten.

II.9 Root Mean Square Deviation (RMSD)

Forecasting methods atau metode prediksi memiliki beberapa cara untuk mengukur *error* nya, salah satunya yaitu menggunakan *Root Mean Square Deviation* (RMSD). RMSD bertujuan untuk mengukur tingkat keakurasan dengan cara menghitung selisih antara nilai prediksi yang diperoleh dari model dan nilai yang diperoleh dari pengamatan atau eksperimen.

Rumus umum RMSD sesuai dengan persamaan (2.67) dengan F sebagai nilai *forecast*, A adalah nilai *actual* (eksperimen) dan S adalah jumlah data.

$$RMSD = \left(\frac{\sum_{s=1}^S (F-A)^2}{S} \right)^{1/2} \quad (2.67)$$

(Armstrong dan Collopy, 1992)

II.10 Buble T

Kesetimbangan uap-cair (*Vapour–Liquid equilibrium*) adalah kondisi dimana liquid dan gasnya berada pada kesetimbangan satu sama lain, kondisi dimana kecepatan evaporasi sama dengan kecepatan kondensasi. Kesetimbangan uap-cair larutan non ideal dapat didekati dengan persamaan berikut:

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (2.68)$$

Dimana :

y_i = fraksi mol komponen i pada fasa uap

x_i = fraksi mol komponen i pada fasa cair

γ_i = koefisien aktivitas komponen i

P = tekanan total sistem

P_i^{sat} = tekanan jenuh komponen i

Tekanan jenuh komponen i dapat dicari dari persamaan Antoinne

$$\ln P_i^{sat} = A - \frac{B}{C+T} \quad (2.69)$$

Dimana :

A, B, C = merupakan konstanta Antoinne yang nilainya berbeda tiap komponen

T = Temperatur (satuan tergantung pada konstanta yang digunakan)

P_i^{sat} = tekanan jenuh komponen i (satuan tergantung pada konstanta yang digunakan)

Pada perhitungan bubble point dan dew point, permasalahan dibagi menjadi 4 bagian utama yaitu: Bubble P , Dew P, Bubble T, dan Dew T.

Pada kasus bubble T biasanya data yang diketahui adalah x_i dan P , Sedangkan data yang ingin dicari : y_i dan T . Dengan demikian penyelesaiannya (dimisalkan dengan mengambil contoh kesetimbangan uap-cair untuk sistem biner atau terdiri dari 2 komponen yang dimisalkan dengan komponen 1 dan 2) menggunakan persamaan (2.68)

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat}$$

Harga x_i dan P dapat diketahui dari data. Maka data yang belum diketahui adalah y_i , γ_i dan P_i sat . Maka persamaan akan menjadi

Untuk komponen 1

$$y_1 P = x_1 \gamma_1 P_1^{sat} \quad (2.70)$$

Untuk komponen 2

$$y_2 P = x_2 \gamma_2 P_2^{sat} \quad (2.71)$$

Sehingga apabila persamaan (2.70) dan (2.71) dijumlahkan akan didapatkan persamaan

$$y_1 P + y_2 P = x_1 \gamma_1 P_1^{sat} + x_2 \gamma_2 P_2^{sat} \quad (2.72)$$

Karena komponen terdiri dari 2 komponen maka $y_1 + y_2 = 1$ maka

$$P = x_1 \gamma_1 P_1^{sat} + x_2 \gamma_2 P_2^{sat} \quad (2.73)$$

dengan memasukan persamaan Antoinne kedalam persamaan di atas, maka harga P dapat diketahui akan tetapi dengan

menggunakan metode trial error atau bisa juga dengan metode iteratif Penjabaran secara trial error dapat dituliskan berikut ini

$$P = x_1 \gamma_1 \exp\left(A_1 - \left(\frac{B_1}{(C_1+T)}\right)\right) + x_2 \gamma_2 \exp\left(A_2 - \left(\frac{B_2}{(C_2+T)}\right)\right) \quad (2.74)$$

Setelah harga P diketahui maka selanjutnya adalah mencari harga yi dengan menggunakan persamaan

$$y_1 = \frac{x_1 \gamma_1 P_1^{sat}}{P} \quad (2.75)$$

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

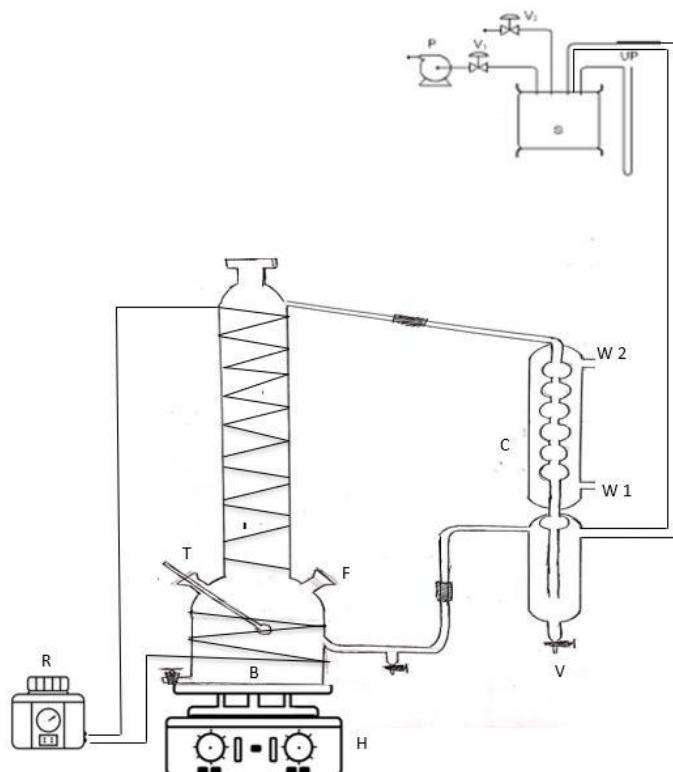
BAB III

METODOLOGI PENELITIAN

Percobaan yang dilakukan berguna untuk memperoleh data kesetimbangan ($T-x,y$). Data yang didapat dari percobaan kemudian dikorelasikan dengan model NRTL dan UNIQUAC untuk mendapatkan parameter interaksinya. Adapun prediksi dilakukan menggunakan model UNIFAC.

III.1 Peralatan Percobaan

Alat utama yang digunakan untuk memperoleh data kesetimbangan uap-cair ini adalah *Othmer Still* seperti yang ditunjukkan pada Gambar III.1 yang dilengkapi dengan thermokopel dan manometer raksasa. *Othmer Still* yang digunakan terdiri dari tabung pemanas (*boiler*) yang berfungsi untuk memasukkan dan memanaskan umpan (*feed*), kondensor yang digunakan untuk mengkondensasi fase uap yang terbentuk, serta tabung penampung sampel uap dan liquid. Peralatan *Othmer Still* terhubung dengan pompa vakum dan manometer raksasa. Percobaan penelitian kesetimbangan uap-cair ini diawali dengan memasukan larutan etanol(1)+eugenol(2) dengan komposisi tertentu dimasukkan ke dalam *boiler* (B), seperti yang ditunjukkan dalam Gambar III.1. Untuk tekanan 400 mmHg, menghidupkan pompa vakum (P) untuk menciptakan kondisi vakum. Sebelum larutan dipanaskan, kondensor (C) dialiri air pendingin melalui W1 dan W2 terlebih dahulu. Selanjutnya larutan dipanaskan menggunakan *heater* dan menyalakan *stirrer* (H) agar homogen. Fase uap akan terdorong menuju kondensor (C) lalu terjadi kondensasi dan jatuh menuju tabung V (tempat pengambilan sampel uap) sebagai distilat dan sebagian akan jatuh menuju boiler. Proses pemanasan ini terus berulang (resirkulasi) hingga sistem mencapai kondisi kesetimbangan yang ditandai oleh suhu konstan di dalam *boiler*. Setelah sistem mencapai kondisi kesetimbangan, Sampel fase cair dan uap diambil, kemudian dianalisa dengan refraktometer untuk mengetahui komposisinya.



Gambar III. 1 Peralatan Othmer StillKeterangan :

P : Pompa vakum
 V1 : Valve ke Pompa Vakum
 V2 : Valve pengatur tekanan
 UP : Pipa U (manometer raksasa)
 R : Tangki Stabilizer
 C : Kondensor
 F : Feed masuk
 R : Regulator (Pemanas Listrik)

V : Pengambilan Sampel Uap
 L : Pengambilan Sampel Liquid
 B : Boiler yang dilengkapi Pemanas
 T : Resistance Temperature Detector
 W1 : Air pendingin masuk
 W2 : Air pendingin keluar
 H : Heater dan Stirrer

III.2 Bahan Percobaan

Bahan-bahan yang digunakan pada percobaan ini adalah:

1. Etanol dengan kemurnian 99,8% (MERCK)
2. Eugenol dengan kemurnian 99,9% (PT. Indesso Niagatama).

III.3 Variabel Percobaan

Variabel yang digunakan dalam pengukuran kesetimbangan uap cair adalah tekanan vakum 400 mmHg dan tekanan atmosfer.

III.4 Prosedur Percobaan

Tahap percobaan untuk memperoleh data kesetimbangan uap-cair adalah sebagai berikut:

1. Menyusun peralatan Othmer Still seperti pada Gambar III.1
2. Membuat campuran etanol (1) + eugenol(2) untuk berbagai komposisi (sistem biner).
3. Memasukkan sampel larutan ke dalam tabung umpan (U) sampai tabung *boiler* (B) penuh ditandai dengan terendamnya ujung termokapel (T) dalam tabung *boiler* (B)
4. Mengalirkan air pendingin melalui kondensor (C).
5. Menyalakan pemanas listrik (H) dan *stirrer*
6. Menciptakan tekanan sistem yang ditentukan menggunakan pompa vakum (P).
7. Setelah tercapai kesetimbangan yang ditandai dengan stabilnya suhu dan terjadi *overflow* , suhu tersebut dicatat.
8. Mengambil sampel untuk fase cair (pada *valve* L) dan fase uap (pada *valve* V).

Tahap analisa dengan menggunakan refraktometer:

- 1) Meneteskan aquades pada bagian prisma refraktometer menggunakan pipet mata
- 2) Membersihkan aquadest yang tersisa pada refraktometer menggunakan kertas tissue
- 3) Meneteskan 1 – 3 tetes larutan sampel

- 4) Mengatur cahaya yang masuk sehingga garis batas terang gelap memotong titik perpotongan dua garis diagonal yang ada pada refraktometer
- 5) Membaca *refractive index* yang tertera
- 6) Membilas prisma dengan aquades serta mengeringkan refraktometer dengan tissue
- 7) Diperoleh fraksi masing-masing dengan mensubstitusi nilai *refractive index* ke persamaan *trend line* dari kurva kalibrasi.

III.5 Algoritma Metodologi Penelitian

III.5.1 Algoritma Metode Penelitian

Penelitian dilakukan dengan mengikuti langkah-langkah sebagai berikut:

1. Melakukan eksperimen sesuai prosedur
2. Mengambil sampel uap dan sampel liquid untuk dianalisa menggunakan alat refraktometer
3. Menghitung koefisien aktivitas dari data eksperimen
4. Melakukan tes konsistensi termodinamika
5. Menghitung parameter persamaan NRTL dan UNIQUAC
6. Mengkorelasikan data yang diperoleh dari eksperimen
7. Membuat plot diagram T-x-y dari hasil eksperimen
8. Menghitung deviasi antara hasil eksperimen dengan perhitungan

III.5.2 Algoritma Perhitungan Korelasi dengan Persamaan NRTL

Langkah-langkah perhitungan koefisien aktivitas dan parameter menggunakan persamaan NRTL adalah sebagai berikut

1. Memasukkan nilai konstanta gas ideal (R), temperatur (T), dan komposisi tiap komponen sesuai dengan hasil eksperimen (x_i^{exp}).
2. Memilih harga pendekatan awal untuk parameter b_{ij} , b_{ji} , dan α dengan ketentuan nilai α pada rentang $0,2 - 0,47$ (Renon dan Prausnitz, 1968).

3. Menghitung γ_i eksperimen dengan persamaan (2.8) . Menghitung nilai τ_{ji} , τ_{ij} , G_{ji} , dan G_{ij} menggunakan T hitungan dengan persamaan (2.24) sampai dengan (2.27)
4. Menghitung $\ln \gamma_1^{calc}$ dan $\ln \gamma_2^{calc}$ menggunakan persamaan (2.28) seperti berikut

$$\ln \gamma_1^{calc} = x_2^2 \left[\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \frac{G_{12} \tau_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right]$$

$$\ln \gamma_2^{calc} = x_1^2 \left[\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \frac{G_{21} \tau_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right]$$

5. Menghitung nilai *Objective Function* (OF) menggunakan rumus berikut.

$$OF = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \left[\left(\frac{\gamma_j^{exp} - \gamma_j^{calc}}{\gamma_j^{exp}} \right) \right]^2 \quad (3.1)$$

6. Melakukan solver untuk harga b_{ij} , b_{ji} dan a sehingga diperoleh nilai *Objective Function* (OF) yang minimum

III.5.3 Algoritma Perhitungan Korelasi dengan Persamaan UNIQUAC

Langkah-langkah perhitungan koefisien aktivitas dan parameter menggunakan persamaan UNIQUAC adalah sebagai berikut :

1. Memasukkan nilai konstanta gas ideal (R), temperatur (T), dan komposisi tiap komponen sesuai dengan hasil eksperimen (x_i^{exp}).
2. Memilih harga pendekatan awal untuk parameter a_{ij} dan a_{ji}
3. Menghitung τ_{ij} , τ_{ji} , l_i , θ_i , dan Φ_i menggunakan T hitungan dengan persamaan (2.32), (2.33), (2.34) dan (2.40) seperti berikut.

$$\tau_{ij} = \exp \left(-\frac{a_{ij}}{RT} \right)$$

$$\tau_{ji} = \exp\left(-\frac{a_{ji}}{RT}\right)$$

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1)$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j}$$

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j}$$

4. Menghitung $\ln \gamma_i^{\text{calc}}$ menggunakan rumus berikut.

$$\begin{aligned} \ln \gamma_i^{\text{calc}} = & \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + \phi_j \left(l_i - \frac{r_i}{r_j} l_j \right) \\ & - q_i \ln (\theta_i + \theta_j \tau_{ji}) \\ & + \theta_j q_i \left(\frac{\tau_{ji}}{\theta_i + \theta_j \tau_{ji}} - \frac{\tau_{ij}}{\theta_j + \theta_i \tau_{ij}} \right) \end{aligned}$$

dimana $z = 10$.

7. Menghitung nilai *Objective Function* (OF) menggunakan rumus berikut.

$$OF = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \left[\left(\frac{\gamma_j^{\text{exp}} - \gamma_j^{\text{cal}}}{\gamma_j^{\text{exp}}} \right) \right]^2$$

8. Melakukan solver untuk harga a_{ij} dan a_{ji} sehingga diperoleh nilai *Objective Function* (OF) yang minimum

III.5.4 Algoritma Perhitungan Kesetimbangan Uap - Cair

Langkah-langkah perhitungan kesetimbangan uap-cair adalah sebagai berikut :

1. Memasukkan nilai R, P, x_i ,

2. Menghitung T trial dengan persamaan :

$$T = \sum_i x_i T_i^{sat} \quad (3.2)$$

3. Menghitung P_1^{sat} dan P_2^{sat} dengan menggunakan nilai T trial awal, menggunakan persamaan Antoine diperoleh

$$\log_{10} P_i^{sat} = A - \frac{B}{T+C} \quad (3.3)$$

4. Menghitung γ_i dan γ_j untuk masing-masing komponen dengan menggunakan parameter yang didapatkan dari NRTL dan UNIQUAC.
5. Menghitung nilai P_j^{sat} dengan persamaan, dimana komponen j adalah komponen kunci:

$$P_1^{sat} = \frac{P}{\sum x_i y_i (P_i^{sat}/P_j^{sat})} \quad (3.4)$$

6. Menghitung nilai T baru menggunakan persamaan Antoine sebagai berikut :

$$T = \frac{B_1}{A_1 - \log P_1^{sat}} - C_1 \quad (3.5)$$

7. Jika $T_{awal} - T_{baru} < error$ yang ditetapkan, maka T_{baru} adalah T yang dicari, dan lanjut ke langkah 8 (selanjutnya), jika $T_{awal} - T_{baru} > error$, maka ulangi perhitungan dari langkah 1, dengan menjadikan T_{baru} sebagai T

8. Menghitung y_i menggunakan persamaan :

$$y_i = \frac{x_i y_i P_1^{sat}}{P} \quad (3.6)$$

9. Menghitung AARD T dan AARD y_1

$$AARD y_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{y_{1,i,cal} - y_{1,i,exp}}{y_{1,i,exp}} \right| \times 100\% \quad (3.7)$$

$$AARD T = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T_{1,i,cal} - T_{1,i,exp}}{T_{1,i,exp}} \right| \times 100\% \quad (3.8)$$

III.5.5 Algoritma Perhitungan Koefisien Aktivitas Kesetimbangan uap-cair menggunakan Persamaan UNIFAC

Langkah-langkah perhitungan koefisien aktivitas dan parameter menggunakan persamaan UNIFAC adalah sebagai berikut :

1. Memasukkan nilai konstanta gas ideal (R) dan temperatur (T)
2. Menentukan P dan x1.
3. Menentukan pembagian group dari masing-masing spesi etanol dan eugenol
4. Menghitung r_i , q_i , l_i , θ_i , dan Φ_i menggunakan persamaan 2.43 sampai dengan 2.48 seperti berikut:

$$r_i = \sum_k v_k^{(1)} R_k$$

$$q_i = \sum_k v_k^{(1)} Q_k$$

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1)$$

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j}$$

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j}$$

5. Menghitung $\ln \gamma_i^c$ combinatorial menggunakan persamaan 2.42 seperti rumus berikut.

$$\ln \gamma_i^c = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j$$

6. Menentukan group-group parameter interaction (a_{mn}) dan menghitung ψ_{mn} melalui persamaan 2.53 seperti berikut :

$$\psi_{mn} = \exp \left(\frac{-a_{mn}}{T} \right)$$

7. Menghitung $\ln \gamma_i$ residual dengan persamaan-persamaan 2.49 hingga 2.52 seperti berikut :

$$\ln \gamma_i^R = \sum_k v_k^{(i)} \left(\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(1)} \right)$$

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \frac{\theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \theta_n \Psi_{nm}} \right]$$

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n}$$

$$X_m = \frac{\sum_j v_m^{(j)} x_j}{\sum_j \sum_n v_n^{(j)} x_j}$$

8. Menghitung $\ln \gamma_i$ dengan persamaan 2.41 seperti berikut :

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R$$

9. Menghitung γ_1 dan γ_2
 10. Menggunakan nilai γ_1 dan γ_2 dalam perhitungan BUBL T untuk mendapatkan y dan T.
 11. Mengulangi percobaan untuk x1 yang berbeda. x1 yang digunakan dalam rentang 0 – 1 dengan in kremen 0,005

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

IV.1 Validasi Alat

Perhitungan validasi alat ini bertujuan untuk mengetahui alat yang akan digunakan dalam eksperimen telah berada dalam kondisi akurat dan dapat digunakan dengan baik. Memvalidasi alat *Othmer Still* dengan cara mengukur suhu uap zat murni etanol dan membandingkannya dengan persamaan *Antoine* berikut:

$$\ln P_i^{sat}(kPa) = A - \frac{B}{T(^{\circ}C) + C}$$

Hasil validasi alat dengan konstanta persamaan *Antoine* yang didapat dari dua literatur. Validasi dilakukan dengan menghitung *Absolute Deviation* (AD) dan *Root Mean Square Deviation* (RMSD) antara temperatur uap eksperimen dengan persamaan *Antoine* pada berbagai tekanan. Persamaan AD dan RMSD ditunjukkan sebagai berikut:

$$AD = [t_i^{sat}(\text{eksperimen}) - t_i^{sat}(\text{literatur})]$$

$$RMSD = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left[\frac{t_i^{sat}(\text{eksperimen}) - t_i^{sat}(\text{Literatur})}{n} \right]^2}$$

(Zheng dkk, 2018)

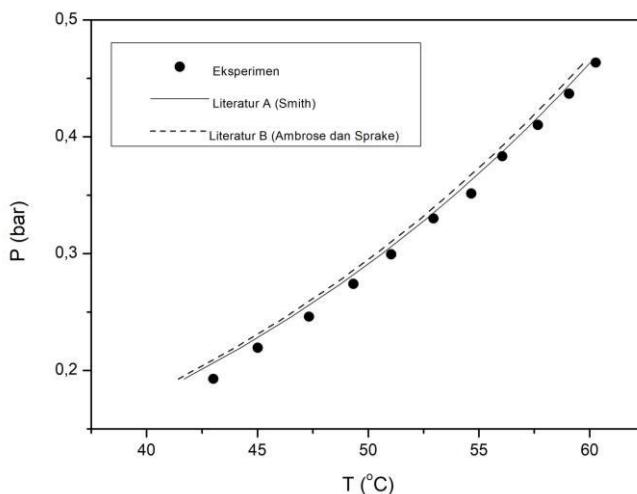
Setelah dihitung, didapatkan nilai AD^a dan AD^b sebesar 1,324 °C dan 1,581°C, serta RMSD masing-masing literatur a dan b adalah 0,78423 dan 0,9088 yang ditunjukkan pada Tabel IV.1 serta diilustrasikan pada Gambar IV.1. Hal ini menunjukkan bahwa alat *Othmer Still* telah dapat digunakan dalam pengukuran temperatur uap-cair.

Tabel IV. 1 Hasil Validasi Alat dengan Korelasi terhadap Persamaan Antoine

P ^{exp} (bar)	T ^{exp} (°C)	T ^a (°C)	T ^b (°C)	AD ^a	AD ^b
0,193	43	41,69	41,43	1.324	1.581
0,219	45	44,25	43,99	0.772	1.034
0,246	47,3	46,55	46,29	0.775	1.040
0,274	49,3	48,76	48,49	0.579	0.848
0,299	51	50,59	50,32	0.451	0.724
0,330	52,9	52,64	52,37	0.307	0.583
0,351	54,6	53,98	53,70	0.679	0.958
0,383	56,1	55,85	55,57	0.207	0.489
0,410	57,7	57,32	57,03	0.348	0.632
0,437	59,1	58,71	58,42	0.366	0.653
0,463	60,3	60,02	59,73	0.253	0.542
		RMSD T	0,7423	0,9088	

^a Menggunakan parameter persamaan Antoine dari Smith, 1973

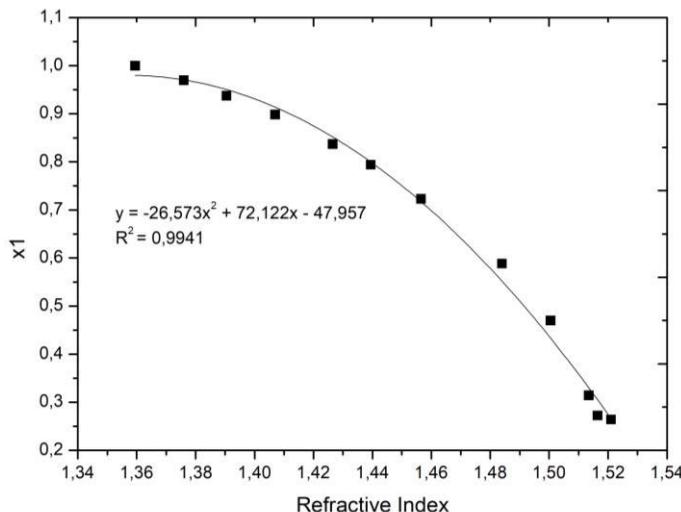
^b Menggunakan parameter persamaan Antoine dari Ambrose dan Sprake, 1970



Gambar IV. 1 Grafik Tekanan Uap Etanol berdasarkan Eksperimen Terhadap Persamaan Antoine dari Literatur

IV.2 Kurva Kalibrasi Refraktometer

Dalam penelitian ini juga dilakukan kalibrasi alat refraktometer agar mendapatkan hasil analisa yang tepat. Kalibrasinya berupa kurva kalibrasi antara *Refractive Index* terhadap fraksi mol etanol (x_1) yang ditunjukkan pada Gambar IV.2



Gambar IV. 2 Kurva Kalibrasi Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) dengan Analisa Refraktometer

IV.3 Data Eksperimen dan Tes Konsistensi Termodinamika

Percobaan kesetimbangan uap cair campuran 2 komponen yakni etanol(1)+eugenol(2) pada ebuliometer termodifikasi akan menghasilkan fase uap dan fase liquid . Kedua sampel baik uap maupun liquid kemudian di analisa dengan menggunakan refraktometer untuk mengetahui komposisi di masing masing fase. Pada penelitian ini telah di peroleh data

kesetimbangan uap cair sistem biner etanol (1) + eugenol (2) pada tekanan 400 mmHg dan atmosfer yang tersedia pada Tabel IV.2 dan Tabel IV.3, Karena eksperimen di lakukan pada tekanan rendah dan fase uap di asumsikan sebagai gas ideal sehingga $\varphi^V = 1$ dan $\varphi^S = 1$, sehingga koefisien aktifitas γ_i dari data eksperimen dihitung dengan persamaan sebagai berikut

$$\gamma_i = \frac{P y_i}{P_i^S x_i} \quad (4.1)$$

Tabel IV. 2 Data Analisa Eksperimen Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol pada Tekanan 400mmHg

T (°C)	Fraksi Mol			
	x ₁	x ₂	y ₁	y ₂
66,6	1	0	1	0
66,8	0,9024	0,0976	0,9795	0,0205
67,6	0,7599	0,2401	0,9794	0,0206
69,7	0,6225	0,3775	0,9792	0,0208
75,8	0,4741	0,5259	0,9789	0,0211
86,7	0,3210	0,6790	0,9785	0,0215
103,9	0,2168	0,7832	0,9768	0,0232
147,7	0,1571	0,8429	0,9753	0,0247
161,1	0,1288	0,8712	0,9730	0,0270
232,2	0	1	0	1

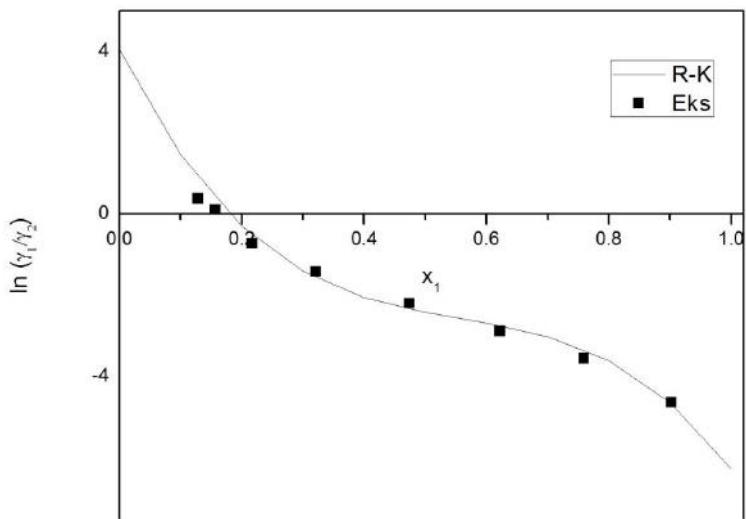
Tabel IV. 3 Data Analisa Eksperimen Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) pada Tekanan Atmosfer

T (°C)	Fraksi Mol			
	x ₁	x ₂	y ₁	y ₂
81,3	1	0	1	0
84,5	0,902	0,098	0,9795	0,0205
86,9	0,762	0,238	0,9794	0,0206
96,	0,558	0,442	0,9793	0,0207
100,4	0,418	0,582	0,9789	0,0211
107,5	0,321	0,679	0,9785	0,0215
141,7	0,176	0,824	0,9721	0,0279
167,2	0,131	0,869	0,9491	0,0509
243*	0	1	0	1

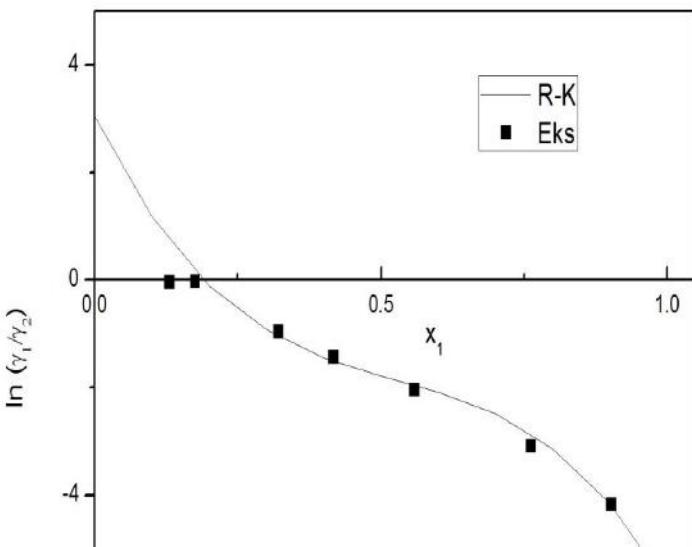
* Dihitung menggunakan persamaan Antoine

Data percobaan yang sudah diperoleh selanjutnya dipastikan terlebih dahulu keakuratannya secara thermodinamika

sehingga dapat diolah dan diperoleh parameter dari persamaan korelasi yang akurat dan nilai OF (*Objective Function*) seminimal mungkin. Data kesetimbangan uap-cair yang di peroleh seharusnya konsisten dan memenuhi tes konsistensi thermodinamika, dalam hal ini memenuhi persamaan Gibbs-Duhem. Penentuan kosistensi dilakukan dengan melakukan plot antara \ln perbandingan koefisien aktifitas (γ_1/γ_2) dan G^E/RT percobaan terhadap komposisi cair (x), seperti pada persamaan (2.62) dimana luas daerah di atas dan di bawah sumbu x harus sama. Plot grafik $\ln(\gamma_1/\gamma_2)$ vs x_1 hasil eksperimen di tunjukan pada Gambar IV.3 dan Gambar IV.4



Gambar IV. 3 Grafik Konsistensi Sistem Etanol (1) + Eugenol pada Tekanan 400 mmHg



Gambar IV. 4 Grafik Konsistensi Sistem Etanol (1) + Eugenol pada Tekanan Atmosfer

Menurut Philip dkk, (1994) penyusunan *trend line* yang paling sesuai dengan $\ln(\gamma_1/\gamma_2)$ dan G^E/RT hasil percobaan adalah dengan menggunakan persamaan ekspansi Redlich-Kister. Setelah didapat *trend* persamaan yang paling mewakili distribusi data yang telah diplot, kemudian dari plot tersebut dicari nilai-nilai absolut selisih luasan. Salah satu metode uji konsistensi thermodinamika adalah metode luasan sebagaimana disarankan oleh Herington , dimana pengaruh entalpi pencampuran dihitung dengan persamaan (2.65) dan data percobaan dikatakan konsisten bila memenuhi persamaan (2.66). pada metode tersebut peroleh hasil seperti pada Tabel IV.4 sebagai berikut.

Tabel IV. 4 Metode Luasan Ekspansi Persamaan Redlich Kister dan Herrington

Sistem	Tekanan	A	B	D (%)	J (%)	D-J %	Hasil
Etanol (1) +	400 mmHg	2.307	0.324	75.39	73.05	2.34	(+)
Eugenol (2)	Atmosfer	1.888	0.255	76.17	71.14	5.04	(+)

Konsisten jika $|D-J| \% < 10$

Dari Tabel IV.4 dapat dilihat bahwa data eksperimen telah memenuhi syarat dari teskonsistensi yang digunakan, sehingga dapat percobaan tersebut dapat dikatakan konsisten dan dapat diolah dan dihitung parameternya dengan korelasi persamaan NRTL dan UNIQUAC.

IV.4 Korelasi Kesetimbangan Uap-Cair Etanol (1) + Eugenol (2)

Eksperimen dilakukan dengan cara mengukur suhu uap – cair campuran sistem biner dengan kondisi isobarik pada tekanan 400mmHg dan atmosfer. Data-data percobaan yang diperoleh telah diuji konsistensinya menggunakan tes konsistenstii Thermodynamika, selanjutnya data hasil percobaan tersebut dikorelasikan dengan persamaan model NRTL dan UNIQUAC sehingga diperoleh parameter optimal dari kedua permodelan tersebut.

Pada model UNIQUAC optimasi parameter dilakukan pada dua parameter yaitu A_{12} dan A_{21} . Sedangkan pada model NRTL, optimasi dilakukan pada dua parameter yaitu b_{12} dan b_{21} , sedangkan parameter ketiga, α , ditentukan besarnya terlebih dahulu. Pada perhitungan, nilai α ditetapkan sebesar 0,4 karena sistem biner ini terdiri dari alkohol dan zat nonpolar. (Renon dan Prausnitz, 1968)

Fitting parameter ini dihitung dengan meminimalkan nilai *Objective Function* (OF) dengan rumus:

$$OF = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \left[\left(\frac{\gamma_j^{exp} - \gamma_j^{calc}}{\gamma_j^{exp}} \right) \right]^2 \quad (4.2)$$

Setelah mendapatkan parameter masing-masing model, kemudian melakukan perhitungan prediksi T-x-y BUBBLE T untuk kesetimbangan uap-cair dan memhitung deviasi antara data eksperimen dan permodelan menggunakan *Absolute Average Relative Deviation* (AARD) dengan rumus sebagai berikut:

$$AARD y_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{y_{1,i,cal} - y_{1,i,exp}}{y_{1,i,exp}} \times 100\% \right| \quad (4.3)$$

$$AARD T = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T_{1,i,cal} - T_{1,i,exp}}{T_{1,i,exp}} \times 100\% \right| \quad (4.4)$$

Perhitungan korelasi ini dilakukan menggunakan dua parameter *Antoine* dari sumber yang berbeda agar mendapatkan hasil yang lebih tepat. Yang pertama menggunakan parameter literatur A yakni parameter *Antoine* Etanol (Gmehling, 1978) dan parameter *Antoine* Eugenol (Zamrony dan Rizal, 2017). Berikutnya menggunakan parameter literatur B yakni parameter *Antoine* Etanol (Ambrose dan Sprake, 1975) dan parameter *Antoine* Eugenol (Stull, 1947). Dimana parameter biner dan AARD berbagai model yang telah dioptimasi disajikan pada Tabel IV.5. Dari data pada Tabel IV.5 terlihat bahwa apabila menggunakan parameter Antoine literatur A maka korelasi NRTL cenderung memiliki AARD T dan y_1 yang lebih kecil. Sedangkan pada penggunaan literatur B menunjukkan korelasi UNIQUAC cenderung memiliki AARD T dan y_1 yang lebih kecil. Apabila membandingkan nilai AARD T pada korelasi dan tekanan yang sama dengan literatur yang berbeda maka didapatkan selisih yang tak begitu jauh sebagai contoh yakni AARD T korelasi NRTL tekanan atmosfer menggunakan literatur A bernilai 1,28 % sedangkan menggunakan literatur B bernilai 1,69 %. Hal ini menunjukkan bahwa parameter *Antoine* literatur A maupun literatur B tidak berbeda jauh sehingga keduanya dapat dipakai dalam perhitungan korelasi. Selanjutnya apabila membandingkan

data pada tekanan 400 mmHg dan atmosfer diketahui bahwa hasil korelasi pada tekanan 400 mmHg cenderung memiliki error yang lebih besar sebagai contoh korelasi UNIQUAC pada tekanan 400 mmHg memiliki nilai AARD T sebesar 7,525 %., Hal tersebut menunjukkan bahwa data eksperimen pada tekanan atmosferik lebih memiliki kesuaian.

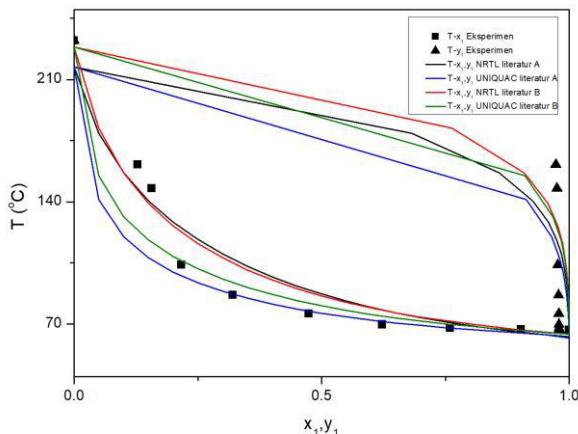
Tabel IV. 5 Korelasi Parameter NRTL dan UNIQUAC terhadap AARD Suhu dan Komposisi Uap Sistem Biner

Parameter <i>Antoine</i>	Model	Parameter A _{ij} (cal/mol)	Parameter A _{ji} (cal/mol)	α	OF	AARD T (%)	AARD y ₁ (%)
Literatur A							
Tekanan 400 mmHg							
Etanol (Gmehling,1978)	NRTL UNIQUAC	-393,56 -230,392	346,28 252,237	0,4 -	13,330 2,659	3,05 6,523	2,69 1,639
Tekanan Atmosfer							
Eugenol (Zamrony dan Rizal, 2017)	NRTL UNIQUAC	-1001,15 -532,295	1061,76 366,025	0,4 -	5,012 0,767	1,28 1,417	1,56 1,732
Literatur B							
Tekanan 400 mmHg							
Etanol (Ambrose dan Sprake, 1975)	NRTL UNIQUAC	-838,82 -342,686	306,32 237,588	0,4 -	7,783 2,546	2,90 7,525	1,82 1,739
Tekanan Atmosfer							
Eugenol (Stull, 1947)	NRTL UNIQUAC	-1203,07 -562,899	1658,81 437,693	0,4 -	4,353 0,653	1,69 4,887	1,32 1,374

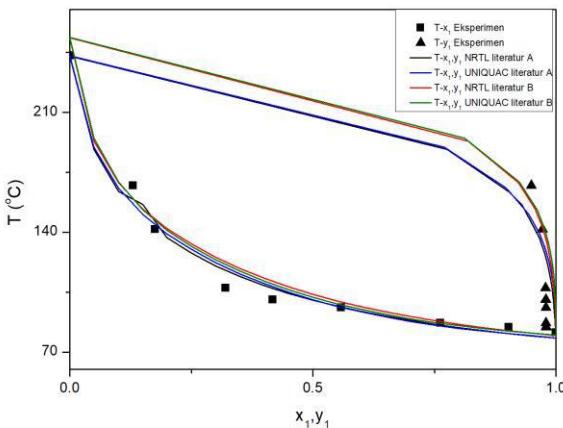
*Parameter biner untuk model NRTL $A_{ij} = b_{12}$, $A_{ji} = b_{21}$ dan UNIQUAC $A_{ij} = A_{12}$, $A_{ji} = A_{21}$

Korelasi permodelan ini juga dapat diplot antara komposisi kesetimbangan uap-cairnya dengan temperatur seperti Gambar IV.5 untuk tekanan 400 mmHg dan Gambar IV.6 untuk tekanan atmosfer , dimana x_1 dan y_1 adalah fraksi mol etanol. Pada masing-masing grafik juga dibandingakan antara korelasi literatur A dan juga korelasi literatur B. Literatur A yakni parameter *Antoine* Etanol (Gmehling,1978) dan parameter *Antoine* Eugenol (Zamrony dan Rizal, 2017) . Sedangkan literatur B yakni parameter *Antoine* Etanol (Ambrose dan Sprake, 1970)

dan parameter *Antoine* Eugenol (Stull, 1947). Dari Gambar IV.5 terlihat bahwa korelasi dengan menggunakan parameter *Antoine* literatur A maupun B memiliki profil grafik yang sama, Selain itu beberapa titik eksperimen juga terlihat berhimpit dengan korelasi. Sedangkan pada Gambar IV.6 menunjukkan bahwa penggunaan parameter *Antoine* yang berbeda tidak memberikan perbedaan yang signifikan. Selain itu juga dapat dilihat bahwa lebih banyak titik eksperimen yang berhimpit dengan korelasi menunjukkan adanya kesesuaian data eksperimen dengan korelasi.



Gambar IV. 5 Grafik $T-x_1-y_1$ pada Kesetimbangan Uap-Cair Etanol(1)+Eugenol(2) pada Tekanan 400 mmHg



Gambar IV. 6 Grafik T-x₁-y₁ pada Kesetimbangan Uap-Cair Etanol(1)+Eugenol(2) pada Tekanan Atmosfer

Selain dari kondisi AARD eksperimen dengan kedua permodelan yang cenderung memiliki deviasi yang kecil, dapat juga dilihat dari plot kesetimbangan uap cair kedua sistem yang disajikan pada Gambar IV.5 dan Gambar IV.6 tampak data eksperimen cukup berhimpit dengan permodelan, sehingga dapat dicermati bahwa permodelan NRTL dan UNIQUAC secara umum dapat merepresentasikan data eksperimen.

IV.5 Prediksi Kesetimbangan Uap-Cair Etanol (1) + Eugenol

Metode UNIFAC merupakan metode prediksi yang tidak membutuhkan data eksperimen . Merupakan pengembangan dari model UNIQUAC dengan memodifikasi interaksi antara komponen menjadi interaksi antara grup fungsional penyusun sistem. Pada kesetimbangan Uap-cair digunakan untuk memprediksi koefisien aktifitas dari suatu sistem yang secara eksperimen belum diteliti. Pada penelitian ini metode prediksi digunakan untuk memperoleh data kesetimbangan uap-cair untuk

sistem biner etanol(1) + eugenol(2) pada berbagai tekanan, yakni 400 mmHg, 500 mmHg, 600 mmHg dan tekanan atmosfer. Data prediksi akan dibandingkan dengan data eksperimen sesuai dengan tekanannya. Adapun grup *identification* parameter dari masing-masing komponen yang terlibat ditunjukkan pada Tabel IV.7 berikut.

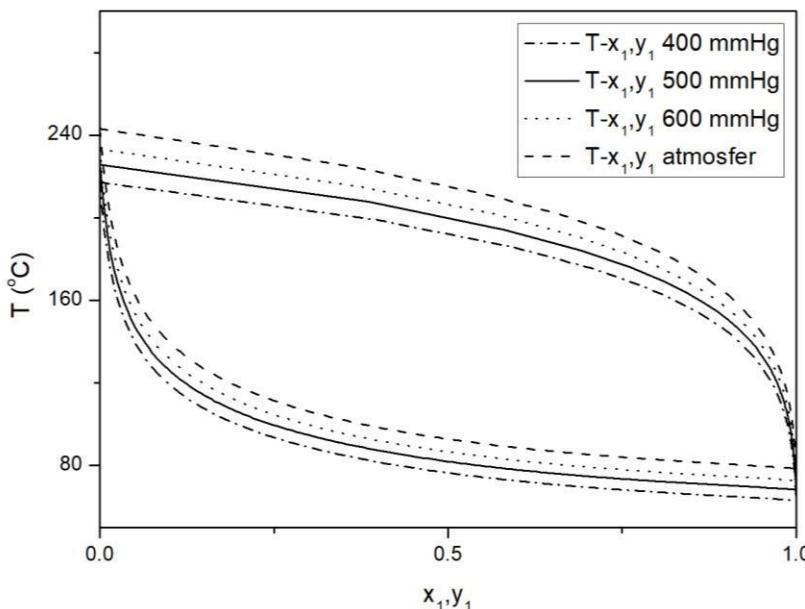
Tabel IV. 6 UNIFAC Group Identification

Molekul	Grup	Main	Secondary	V _k	R _k	Q _k
Eugenol	CH ₃ O	13	24	1	1,145	1,088
	AC	3	10	1	0,3652	0,12
	ACOH	8	17	1	0,8952	0,68
	ACH	3	9	3	0,5313	0,4
	ACCH ₂	4	12	1	1,0396	0,66
	CH=CH ₂	2	5	1	1,3454	1,176
Etanol	CH ₃	1	1	1	0,9011	0,848
	CH ₂	1	2	1	0,6744	0,54
	OH	5	14	1	0,92	1,4

Keterangan :

- V_k = Jumlah spesi yang memiliki group sejenis
- R_k = Group Volume Parameter
- Q_k = Group Area Parameter

Hasil data prediksi kesetimbangan uap-cair untuk sistem biner etanol (1) + eugenol(2) yang diperoleh kemudian diplot untuk mendapatkan grafik T-x-y seperti ditunjukkan pada Gambar IV.7. Prediksi pada Gambar IV.7 dilakukan untuk tekanan 400 mmHg, 500 mmHg, 600 mmHg, dan atmosferik. Dari plot grafik tersebut dapat dilihat bahwa seiring dengan menurunnya tekanan maka suhu kesetimbangan yang diperoleh juga akan semakin menurun. Sehingga dengan adanya penurunan tekanan operasi pada proses distilasi dapat menghindari terjadinya dekomposisi minyak cengkeh akibat suhu yang terlalu tinggi selama proses distilasi.



Gambar IV. 7 Prediksi UNIFAC pada Berbagai Tekanan

Dari hasil prediksi yang didapatkan selanjutnya menghitung deviasi nya dengan hasil eksperimen yang ada yakni pada tekanan 400 mmHg dan atmosfer. Diperoleh nilai AARD seperti pada Tabel IV.8 berikut

Tabel IV. 7 Deviasi Hasil Prediksi UNIFAC

Tekanan	AARD	
	T (%)	y ₁ (%)
400 mmHg	9,261	1,446
Atmosfer	7,893	1,742

Dari Tabel IV.7 tersebut terlihat bahwa AARD y₁ memiliki nilai yang kecil yakni 1,446 % untuk tekanan 400 mmHg dan 1,742 % untuk tekanan atmosfer. Hal ini menunjukkan bahwa nilai y₁ yang

didapat dari eksperimen cukup memiliki kesesuaian dengan y_1 yang didapat dari hasil perhitungan UNIFAC. Sedangkan untuk nilai AARD T nya yakni 9,261 % dan 7,893 %. Hal ini menunjukkan terdapat sedikit selisih antar T yang didapat dari eksperimen dengan T yang didapat dari hasil perhitungan UNIFAC

Pada penelitian ini, apabila membandingkan antara data kesetimbangan hasil eksperimen dengan data hasil prediksi UNIFAC terlihat bahwa pada dasarnya perhitungan prediksi dengan metode UNIFAC memberikan data yang cukup akurat dalam perhitungan kesetimbangan uap cair. Namun data prediksi yang dihasilkan tidak dapat sepenuhnya merepresentasikan data kesetimbangan uap-cair sistem biner etanol(1)+ eugenol(2)

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

V.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian yang telah dilakukan, dapat ditarik kesimpulan sebagai berikut:

1. Data kesetimbangan uap cair pada tekanan 400 mmHg dan atmosfer telah diperoleh secara eksperimen untuk sistem biner etanol (1) + eugenol (2)
2. Hasil korelasi kesetimbangan uap cair sistem biner etanol(1) + eugenol(2) dengan NRTL dan UNIQUAC menghasilkan AARD T dan y_1 maksimal masing-masing sebesar 7,525 % dan 2,69 %.
3. Prediksi data kesetimbangan uap cair T-x-y untuk sistem biner etanol (1) + eugenol (2) dengan metode UNIFAC menghasilkan profil suhu kesetimbangan yang sama dengan eksperimen, dengan AARD T dan y_1 maksimal 9,261 % dan 1,742%

V.2 Saran

Untuk pengembangan penelitian ini diwaktu yang akan datang, diperlukan perbaikan sistem vakum agar mendapatkan suhu kesetimbangan eksperimen yang lebih stabil sehingga hasil korelasi dengan model mendapatkan error yang lebih kecil. Selain itu sistem vakum yang baik akan mencegah suhu agar tidak terlalu tinggi sehingga degradasi eugenol dapat dihindari.

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

DAFTAR PUSTAKA

- Ambrose, D., Sprake, C.H.S., Townsend, R. 2000. "Thermodynamic Properties of Organic Oxygen Compounds. XXXVII. Vapour Pressures of Methanol, Ethanol, Pentan-1-ol, and Octan-1-ol from the Normal Boiling Temperature to the Critical Temperature", J. Chem. Thermodyn., Vol 7, 2, 185-190
- Armstrong, J. S dan Collopy,F. 1992. Error Measures for Generalizing about Forecasting Methods: Empirical Comparisons. International Journal of Forecasting 08, 69-80
- Balitbang Pertanian. 2007. Prospek dan Arah Pengembangan Agribisnis Cengkeh. <http://www.libang.deptan.go.id>.
- Busroni. 2000. Sintesis 1-(3,4 dimetoksi fenil)-2-propanon Turunan Eugenol melalui Pembentukan Senyawa 1-(3,4 dimetoksi fenil)-2-propanil Format Pada Suhu 250-300 0 C.
- Chafer, A., Torre, J., Munoz, R., Burguet, M.C. .2005. "Liquid liquid equilibria of the mixture linalool + ethanol + water at different temperatures." Fluid Phase Equilibria, 238: 72-76.
- Ibrahim, H. R.. 2014. *Makalah Kimia Organik Isi Minyak Atsiri*. Depok: Teknik Kimia Universitas Indonesia
- Fahmi, D., Susilo, B., dan Nugroho, A.W.. 2014. "Pemurnian Etanol Hasil Fermentasi Kulit Nanas (*Ananas comosus L. Merr*) dengan Menggunakan Distilasi Vakum". *Jurnal Keteknikan Pertanian Tropis dan Biosistem* Vol. 2 No. 2 (2014) 131-137
- Geankoplis, C.J. 2003. *Transport Processes and Unit Operations*, 4nd ed., Prentice-Hall International, Tokyo
- Gmehling, J.. 1997. *Vapor-liquid Equilibrium Data Collection*. DECHEMA Chemistry Data Series, Vol 1
- Hutajulu, T. F., Hanafiah, K., Supriatna, D. 2007. Isolasi Eugenol dan β -Kariofilena dari Minyak Daun Cengkeh (*Syrnziginum*

- aromaticum L).* Warta IHP/J of Agro-Based Industry Vol.24 No.2, Desember 2007,pp 32-39
- Kuswandi dan E. Naryono,. 2011. Liquid-Liquid Equilibria for the Ternary System Eugenol+Ethanol+Water at Temperatures 303.15, 313.15 and 323.15 K, *International Review of Chemical Engineering (IReChE)*, Vol. 3, No. 6, November 2011.
- Lawless, J. *The Illustrated Encyclopaedia of Essential Oils*; Barnes & Noble Inc: Northampton, 1995.
- Nurdjannah, N., 2004. Diversifikasi Penggunaan Cengkeh, Persektif. Vol 3. No. 2, 61-70
- Philip, L.J. dan Richard, A.W.. 1994. "Thermodynamic Consistency Tests Based On The Gibbs-DuhemEquation Applied to Isothermal, Binary Vapor-Liquid EquilibriumData: Data Evaluation and Model Testing", Amoco Research Center, Amoco Chemical Company, USA.
- Polling, B.E., J.M Prausnitz, and J.P. O'Connell . 2004. "The Properties Of Gases and Liquids 5th edition", Mc Graw-Hill International Edition, Singapore
- Pratiwi, L., Rachman, M.S., dan Hidayati, N.,2016. "Ekstraksi Minyak Atsiri dari bunga Cengkeh dengan Pelarut Etanol dan N-Heksana". *The 3rd University Research Coloquium*
- R. Fitriani dan Kuswandi, 2013. Kesetimbangan Cair-cair Sistem Quartener Eugenol(1) + β -Caryophyllene(2) + Etanol(3) + Air(4) pada Temperatur 303.15; 313.15 and 323.15 K, *Prosiding Seminar Pascasarjana XIII (SNPs) 2013, Surabaya, 15 Agustus 2013.*
- Rahman R A, Kurniawan D.A. 2014. Pengukuran Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Biner Etanol + 2-Butanol dan Aseton + 2- Butanol, serta Sitem Terner etanol + Aseton + 2-Butanol pada Tekanan 101,33 kPa. Teknik Kimia ITS, Surabaya
- Rama. P. 2008. Bioetanol Ubi Kayu Bahan Bakar Masa Depan. Penerbit Agro Media. Jakarta.

- Renon, H. and Prausnitz, J.M., *Local Composition in Thermodynamics Excess Functions for Liquid Mixtures*, AIChE Journal Vol. 14 1968
- Smith, J.M, Van Ness, H.C., and Abbot, M.M.. 2001. *Chemical Engineering Thermodynamics*, 6th ed. Singapore: McGraw-Hill International Edition.
- Towaha, J. "The Benefits of Cloves Eugenol in Various Industries in Indonesia". Balai Penelitian Tanaman Industri dan Penyegar. Perspektif Vol. 11 No. 2 (2012) 79-90
- Wang, YS., Guo C., Liu, XQ., Huang, SC., Wang, B., Zheng, H., (2013) "Isobaric vapor-liquid equilibrium (VLE) for pinane, dihydromyrcene (DHM) and dihydromyrcenol (DHMOH) at 6 kPa" Fluid Phase Equilibria, Vol.342, 47-51,
- Wisniak, J.,1994. "The Herington Test for Thermodynamic Consistency". *Ind.Eng.Chem.Res*
- Zheng, H., Luo, X., Yin, G.,Chen, J., Zhao, S.,2018. "Vapor Pressure and Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium for Binary Systems of Furfural, 2-Acetyl furan, and 5-Methylfurfural at 3.60 and 5.18 kPa" *J. Chem. Eng. Data* 63, 1, 49-56

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

DAFTAR NOTASI

A_i, B_i, C_i	= Konstanta untuk persamaan <i>Antoine</i>
A	= Luas daerah di atas sumbu x pada luasan tes konsistensi
B	= Luas daerah di bawah sumbu x pada luasan tes konsistensi
b_{12}, b_{21}	= Parameter untuk persamaan NRTL
D	= Nilai deviasi
f_i	= Fugasitas komponen murni i
f_i^0	= Fugasitas pada keadaan standar
f_i°	= Fugasitas komponen i dalam larutan
G, g	= Energi Gibbs molar
G_i°	= Energi Gibbs komponen i pada keadaan standar
G_i	= Energi Gibbs parsial komponen i dalam larutan
G^E	= Energi Gibbs excess
H	= Entalpi
J	= Persamaan tak berdimensi yang didefinisikan Herrington
j	= Parameter Persamaan UNIQUAC
K	= Konstanta kesetimbangan
l	= Parameter Persamaan UNIQUAC
M	= Properti thermodinamika molar atau spesifik
n	= Jumlah mol
P	= Tekanan absolut
P_i^{sat}	= Tekanan uap jenuh komponen i
q_i	= Parameter area untuk komponen <i>i</i>
R	= Konstanta gas ideal
r_i	= Parameter volume untuk komponen <i>i</i>
S	= Entropi

T	= Suhu
u_{12}, u_{21}	= Parameter UNIQUAC
V_i	= Volum molar komponen i
x_i	= Fraksi mol komponen fase liquida pada kesetimbangan
y_i	= Fraksi mol komponen fase uap pada kesetimbangan
z	= Fraksi mol <i>overall</i> komponen

Huruf Greek

γ	= Koefisien aktivitas
ϕ	= Koefisien fugasitas
θ	= <i>Area fraction</i>
α	= Parameter untuk model NRTL
β	= <i>Split Fraction</i>
Δ	= Deviasi
τ	= Konstanta empiris untuk model NRTL dan UNIQUAC

Superscript

C	= <i>Combinatorial</i>
E	= Ekses
id	= Larutan ideal
ig	= Gas ideal
L	= Liquida
S	= <i>Saturated</i>
V	= Fase uap
R	= Residual
0	= Keadaan standar
-	= Properti parsial
^	= Properti dalam larutan

Subscript

i, j, k, l, m	= Komponen dalam campuran
min	= Minimal
max	= Maksimal
c	= <i>Critical</i>
calc	= Nilai dari perhitungan

$eksp$	= Nilai dari eksperimen
i, j	= Komponen ke-
sat	= <i>Saturated</i> (jenuh)
$1,2$	= Komponen 1,2

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

APENDIKS

A.1 Hasil Analisa Eksperimen dengan Menggunakan Refraktometer

Sampel-sampel dianalisa dengan menggunakan refraktometer untuk diketahui kompsisi tiap-tiap komponen. Berikut ini adalah prosedur yang digunakan untuk memperoleh komposisi tiap sampel eksperimen menggunakan alat refraktometer :

1. Kalibrasi

- 1) Membuat larutan etanol (1) + eugenol (2) dengan komposisi yang sudah diketahui
- 2) Meneteskan aquades pada bagian prisma refraktometer menggunakan pipet mata
- 3) Membersihkan aquadest yang tersisa pada refraktometer menggunakan kertas tissue
- 4) Meneteskan 1 – 3 tetes larutan yang telah diketahui komposisinya pada bagian prisma refraktometer menggunakan pipet mata
- 5) Mengatur cahaya yang masuk sehingga garis batas terang gelap memotong titik perpotongan dua garis diagonal yang ada pada refraktometer
- 6) Membaca *refractive index* yang tertera
- 7) Membilas prisma dengan aquades serta mengeringkan refrakto dengan tissue
- 8) Plot grafik antara *refractive index* vs fraksi mol x_1 , lalu mencari *trend line* yang tepat

2. Analisa Sampel

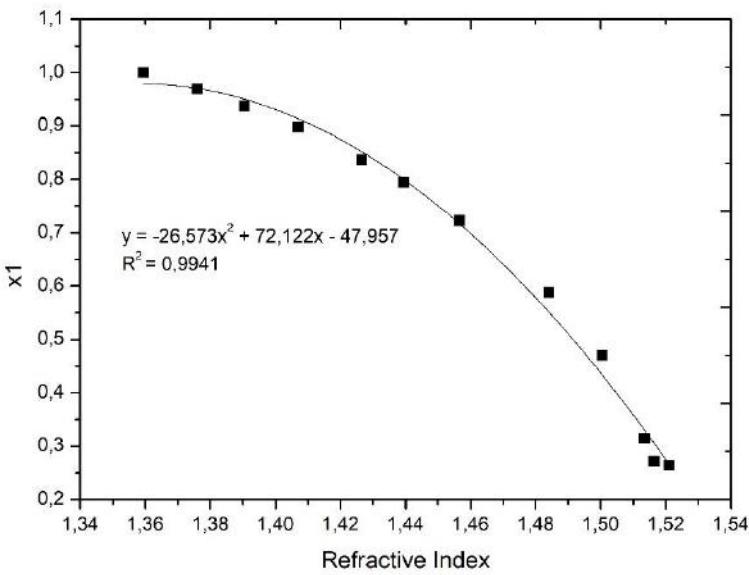
- 1) Meneteskan aquades pada bagian prisma refraktometer menggunakan pipet mata
- 2) Membersihkan aquadest yang tersisa pada refraktometer menggunakan kertas tissue
- 3) Meneteskan 1 – 3 tetes larutan sampel

- 4) Mengatur cahaya yang masuk sehingga garis batas terang gelap memotong titik perpotongan dua garis diagonal yang ada pada refraktometer
- 5) Membaca *refractive index* yang tertera
- 6) Membilas prisma dengan aquades serta mengeringkan refraktometer dengan tissue
- 7) Diperoleh fraksi masing-masing dengan mensubstitusi nilai *refractive index* ke persamaan *trend line* dari kurva kalibrasi.

Hasil perhitungan kalibrasi untuk sistem biner etanol (1) + eugenol (2) terdapat pada Tabel A.1 dan Gambar A.1:

Tabel A. 1 Hasil Kalibrasi Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) Analisa

Fraksi Mol		<i>Refractive Index</i>
x_1	x_2	
1	0	1,3595
0,969	0,031	1,3760
0,937	0,063	1,3905
0,898	0,102	1,4070
0,837	0,1631	1,4265
0,794	0,206	1,4395
0,723	0,277	1,4565
0,588	0,412	1,4840
0,470	0,529	1,5005
0,315	0,685	1,5135
0,272	0,728	1,5165
0,264	0,736	1,5210
0	1	1,5330



Gambar A. 1 Kurva Kalibrasi Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) dengan Analisa Refraktometer

Sehingga setelah disubstitusi ke persamaan *trend line* yang diperoleh, akan didapatkan fraksi mol tiap komponen sampel seperti pada Tabel A.2 dan A.3:

**Tabel A. 2 Data Analisa Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2)
pada Tekanan Atmosfer**

T (°C)	Refractive Index		Fraksi Mol	
	Sampel Liquid	Sampel Uap	x ₁	y ₁
81,3	1,3595	1,3595	1	1
84,5	1,4110	1,3595	0,902	0,9795
86,9	1,4475	1,3605	0,762	0,9794
96	1,4830	1,3610	0,558	0,9793
100,4	1,5025	1,3625	0,418	0,9789
107,5	1,5145	1,3640	0,321	0,9785
141,7	1,5310	1,3740	0,176	0,9721
167,2	1,5325	1,3910	0,131	0,9491
243*	1,5330	1,5330	0	0

* Dihitung menggunakan persamaan Antoine

**Tabel A. 3 Data Analisa Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2)
pada Tekanan 400mmHg**

T (°C)	Refractive Index		Fraksi Mol	
	Sampel Liquid (x)	Sampel Uap (y)	x ₁	y ₁
66,6	1,3595	1,3595	1	1
66,8	1,4110	1,3600	0,9024	0,9795
67,6	1,4480	1,3605	0,7599	0,9794
69,7	1,4730	1,3615	0,6225	0,9792
75,8	1,4950	1,3625	0,4741	0,9789
86,7	1,5145	1,3640	0,3210	0,9785
103,9	1,5265	1,3675	0,2168	0,9768
147,7	1,5320	1,3700	0,1571	0,9753
161,2	1,5325	1,3730	0,1288	0,9730
232,2	1,5330	1,5330	0	0

A.2 Perhitungan Validasi Alat Ebulliometer

Sebelum dilakukan pengukuran kesetimbangan uap cair, peralatan eksperimen terlebih dahulu dilakukan validasi untuk mengetahui kelayakan alat. Dalam hal ini yakni memvalidasi alat *ebulliometer*.

Validasi Alat dengan Pengukuran Suhu Uap Murni Etanol

- Validasi suhu uap murni etanol menggunakan persamaan *Antoine* pada persamaan (3.5) dimana P (kPa) dan T (°C), serta perhitungan *relative error*-nya yang didapatkan harus sangat kecil, agar mendekati hasil yang akurat. Persamaannya sebagai berikut :

$$AD = [T_i^{sat}(\text{eksperimen}) - T_i^{sat}(\text{Antoine})]$$

$$RMSD = \sum_{i=1}^n \left[\frac{T_i^{sat}(\text{eksperimen}) - T_i^{sat}(\text{Antoine})}{n} \right]^{0.5}$$

- Contoh perhitungan pada suhu uap murni etanol, dari persamaan (3.5), dimana data yang diketahui sebagai berikut untuk literatur a:

$$A = 16,6758$$

$$B = 3674,49$$

$$C = 226,45$$

$$T = 43,01 \text{ } ^\circ\text{C (Eksperimen)}$$

$$T \text{ Antoine } (\text{ } ^\circ\text{C}) = \frac{3674,49}{16,6758 - \ln(19,531)} - 226,45$$

$$T \text{ Antoine } (\text{ } ^\circ\text{C}) = 41,687$$

Maka didapatkan:

$$AD = [43,01 - 41,687] = 1,324$$

$$RMSD = \left(\frac{6,0611323}{11} \right)^{0,5} = 0,7423$$

A.3 Perhitungan Tes Konsistensi Thermodinamika dengan Metode Tes Luasan

Dengan membuat plot grafik antara $\ln(\gamma_1/\gamma_2)$ eksperimen dan Redlich-Kister terhadap x_1 kemudian menghitung nilai luas (A dan B), Data dikatakan konsisten bila nilai $D-J < 10\%$, Langkah perhitungan untuk metode luasan adalah sebagai berikut:

1. Data yang diketahui:

- Untuk sistem biner pada etanol (1) + eugenol (2) pada tekanan atmosfer.

$$P = 109,6 \text{ kPa}$$

$$T = 84,464^\circ\text{C}$$

$$x_1 = 0,9023 \quad x_2 = 0,00976$$

$$y_1 = 0,9795$$

$$P_i^{\text{sat}} = 128,66 \text{ kPa}$$

2. Menghitung γ_1 (eksperimen) dan γ_3 (eksperimen) dengan rumus hukum Raoult modifikasi dengan asumsi gas ideal karena tekanan rendah ($\phi=1$), dimana $i=1,2,\dots,n$:

$$\gamma_i(\text{eksperimen}) = \frac{y_i P}{x_i P_i^{\text{sat}}}$$

$$\gamma_1(\text{eksperimen}) = \frac{(0,9795)(109,6)}{(0,9023)(128,66)} = 0,9246$$

Dengan cara yang sama didapatkan:

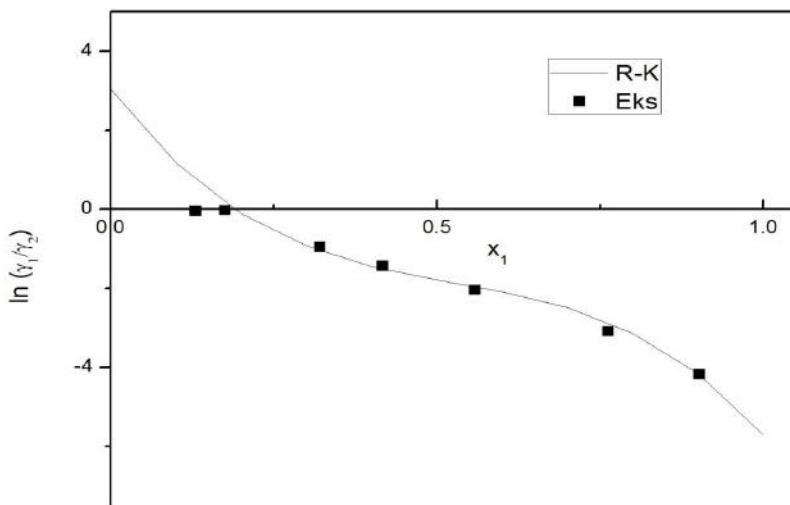
$$\gamma_2(\text{eksperimen}) = 58,766$$

3. Menghitung $\ln(\gamma_1/\gamma_2)$ eksperimen:

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2}(\text{eksperimen}) = \ln \left(\frac{0,9246}{58,766} \right) = -4,1518$$

Dengan cara yang sama didapatkan $\ln(\gamma_1/\gamma_2)$ eksperimen untuk tiap kondisi T (eksperimen) dan x_1 (eksperimen).

- Melakukan plot grafik antara $\ln(\gamma_1/\gamma_2)$ eksperimen dan x_1 seperti Gambar A.3:



Gambar A. 2 Grafik Tes Konsistensi Sistem Etanol (1) + Eugenol (2) pada Tekanan Atmosfer

- Menghitung koefisien persamaan ekspansi Redlich-Kister:

- Persamaan Redlich-Kister:

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = a + b(x_2 - x_1) + c(6x_2x_1 - 1)$$

$$+d(x_2 - x_1)(1 - 8x_1x_2)$$

*nilai a, b, c, dan d mula-mula dilakukan trial.

- Menghitung $\ln(\gamma_1/\gamma_3)$:

Asumsi awal:

a = 1; b = 1; c = 1; d = 1, maka:

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = 1 + 1(0,6459 - 0,3541) \\ + 1(6(0,6459)(0,3541) - 1) \\ + 1(0,6459 - 0,3541)(1 \\ - 8(0,3541)(0,6459))$$

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = 1,4219$$

- 3) Menghitung RMSD:

$$\left[\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} - \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} (\text{eksperimen}) \right]^2 = \left[\Delta \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right]^2 = 58,94$$

Untuk komposisi lain digunakan cara yang sama, kemudian menghitung RMSD dengan rumus:

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left\{ \Delta \ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} \right\}^2}{n}}, \text{ maka di dapat}$$

$$RMSD = 2,901$$

- 4) Melakukan iterasi nilai a, b, c, dan d sehingga nilai RMSD yang diperoleh minimal.

- 5) Setelah iterasi, didapat:

$$a = -1,6330; b = 2,9312; c = -0,3048; d = 1,444$$

dengan RMSD = 0,3074

- 6) Didapat persamaan ekspansi Redlich-Kister:

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = -1,6331 + (2,9312)(x_2 - x_1) \\ + (-0,3048)(6x_2x_1 - 1) \\ + (1,444)(x_2 - x_1)(1 - 8x_1x_2)$$

Kemudian substitusi $x_2 = 1 - x_1$, maka didapat:

$$\begin{aligned}
\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = & -1.633 + (2,9312)(1-x_1) \\
& + (-0,3048)(6(1-x_1)x_1 - 1) \\
& +(1,444)((1-x_1)-x_1)(1 \\
& \quad - 8x_1(1-x_1)) \\
= & F(x)
\end{aligned}$$

- 7) Menghitung luasan grafik persamaan ekspansi Redlich-Kister dengan persamaan (2.61):

$$A = \int_0^{0,190} F(x) dx_1 = 1,888$$

$$B = \int_{0,190}^1 F(x) dx_1 = 0,255$$

Dimana $x_1 = 0,190$ ketika $\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$ eks sama dengan 0

- 8) Dari persamaan ekspansi Redlich-Kister diperoleh:

$$\text{Diperoleh nilai } D = 100\% \times \left| \frac{A-B}{A+B} \right|$$

Persamaan ekspansi ini digunakan untuk mencarilai A (luasan di atas umbu-x) dan B (luasan di bawah sumbu-x) dengan mengintegralkannya pada batas – batas perpotongan di sumbu x, diperoleh nilai $D = 76.17\%$. Untuk menghitung excess entalpi digunakan persamaan (2.65) :

$$J = 150\% \times \left| \frac{T_{max} - T_{min}}{T_{min}} \right|$$

T_{min} = titik didih terendah pada sistem isobarik dalam range $x_1 = 0$ sampai $x_1 = 1$

T_{\max} = titik didih tertinggi pada sistem isobarik dalam range $x_1 = 0$ sampai $x_1 = 1$

Diperoleh nilai $J = 71.136 \%$, sehingga:

$$|D - J| = 5.036 \% \text{ (konsisten)}$$

A.4 Perhitungan Parameter dan Koefisien Aktifitas Fasi Sistem Biner dengan Permodelan

Data-data percobaan yang telah diperoleh dan diuji konsistensinya, selanjutnya dikorelasikan dengan permodelan NRTL dan UNIQUAC sehingga diperoleh parameter optimal dari kedua permodelan tersebut. Persamaan NRTL mengandung tiga parameter, sedangkan persamaan UNIQUAC mengandung dua parameter. Berikut ini merupakan langkah perhitungan yang dilakukan pada masing-masing permodelan:

A.4.1 Perhitungan NRTL

1. Data yang diketahui dari eksperimen:

Sistem biner etanol (1) + eugenol (2) untuk tekanan atmosfer

$$P = 100,96 \text{ kPa}$$

$$T = 86,87^\circ\text{C} = 360,02 \text{ K}$$

$$x_1 = 0,7624 ; x_2 = 0,2376$$

$$y_1 = 0,9794 ; y_2 = 0,0206$$

2. Korelasi Persamaan Koefisien Aktifitas dengan Model Persamaan NRTL

- Menghitung nilai P_i^{sat} menggunakan persamaan Antoine. Konstanta Antoine ditunjukkan pada Tabel A.6:

Tabel A. 4 Konstanta Antoine

Komponen	A	B	C	Satuan
Etanol*	8,1122	1592,864	226,184	$P = \text{mmHg};$ $T = ^\circ\text{C}$
Eugenol**	4,9515	2390,7965	32,7786	$P = \text{bar}; T =$ K

* Dihitung dan dikorelasikan oleh Gmehling, Onken dan Arlt (1977 – 1980)

**Dihitung dan dikorelasikan oleh Rizal dan Zamrony (2017)

Dengan menggunakan persamaan (3.3) didapatkan:

$$\log_{10} P_1^{sat} = \left(8,1122 - \frac{1592,864}{86,87 + 226,184} \right) \cdot \frac{101,3 \text{ kPa}}{760 \text{ mmHg}}$$

$$P_1^{sat} = 140,898 \text{ kPa}$$

$$\log_{10} P_2^{sat} = \left(4,9515 - \frac{2390,7965}{360,02 + (-32,7786)} \right) \cdot \frac{100 \text{ kPa}}{1 \text{ bar}}$$

$$P_2^{sat} = 0,422 \text{ kPa}$$

- 2) Menghitung koefisien aktifitas (γ_i) eksperimen dengan konstanta menggunakan persamaan (3.6)

$$\gamma_1(\text{eksperimen}) = \frac{(0,9794)(100,96)}{(0,7624)(140,898)}$$

$$\gamma_1(\text{eksperimen}) = 0,9206$$

Dengan cara yang sama, didapatkan:

$$\gamma_2(\text{eksperimen}) = 19,7756$$

- 3) Mengasumsi nilai b_{12} dan b_{21} untuk suatu nilai sembarang, kemudian mencari nilai parameter b_{12} dan b_{21} yang memiliki nilai error paling minimum terhadap *objective function* (OF) serta $\alpha = 0,4$

- 4) Menghitung nilai τ_{12} dengan T hitung sebagai berikut :
Dengan $b_{12} = -100 \text{ cal/mol}$ dan $b_{21} = 100 \text{ cal/mol}$, menggunakan persamaan (2.26) dan (2.27)

$$\tau_{12} = \frac{-100}{1,987 \left(\frac{\text{cal}}{\text{mol.K}} \right) \cdot 358,96 \text{ K}} = -1,4036$$

Dengan cara yang sama, diperoleh juga:

$$\tau_{21} = 1,4886$$

- 5) Menghitung G_{12} dan G_{21} dengan $\alpha = 0,4$ menggunakan persamaan 2.24 dan 2.25

$$G_{12} = \exp(-0,4 \times -1,4036)$$

$$G_{12} = 1,7532$$

Dengan cara yang sama, diperoleh juga:

$$G_{21} = 0,5513$$

- 6) Menggunakan parameter biner persamaan NRTL dalam menghitung koefisien aktifitas (γ) menggunakan persamaan (2.22) dan (2.23):

$$\gamma_1(\text{calc})$$

$$= \exp \left(0,2376^2 \left[0,1398 \left(\frac{0,9456}{0,7624 + (0,2376)(0,9456)} \right)^2 + \left(\frac{(1,0575)(-0,1398)}{(0,2376 + (0,7624)(1,0575)^2)} \right) \right] \right)$$

$$\gamma_1(\text{calc}) = 0,9762$$

$$\gamma_2(\text{calc})$$

$$= \exp \left(0,7624^2 \left[-0,1398 \left(\frac{1,0575}{0,2376 + (0,7624)(1,0575)} \right)^2 + \left(\frac{(0,9456)(0,1398)}{(0,7624 + (0,2376)(0,9456)^2)} \right) \right] \right)$$

$$\gamma_2(\text{calc}) = 01,644$$

- 7) Setelah diperoleh nilai γ_1 dan γ_2 eksperimen maupun secara perhitungan untuk masing-masing komposisi x_1 , maka langkah selanjutnya adalah menghitung *Objective Function* (OF) dengan persamaan (3.1):

$$OF = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_i^{\text{eksperimen}} - \gamma_i^{\text{calc}}}{\gamma_i^{\text{eksperimen}}} \right)^2 + \left(\frac{\gamma_2^{\text{eksperimen}} - \gamma_2^{\text{calc}}}{\gamma_2^{\text{eksperimen}}} \right)$$

Nilai OF yang diperoleh adalah 0,90812

- 8) Selanjutnya mengiterasi nilai OF tersebut terhadap b_{12} dan b_{21} dari asumsi awal, sehingga didapatkan nilai sekecil mungkin. Dengan menggunakan fasilitas *Solver* yang ada pada Microsoft Excel, diperoleh:

$$\begin{aligned} \text{OF} &= 0,7160 \\ \alpha &= 0,4 \\ b_{12} &= -1001,149 \text{ cal/mol} \\ b_{21} &= 1061,763 \text{ cal/mol} \end{aligned}$$

3. Perhitungan Prediksi T-x-y BUBLE T untuk Kesetimbangan Uap-Cair

Dari parameter biner yang diperoleh dari perhitungan diatas akan diprediksi kurva T-x-y. Langkah-langkah perhitungan BUBLE T adalah sebagai berikut:

- 1) Menghitung nilai awal T untuk *trial* dengan persamaan (3.2):

$$\begin{aligned} T_{awal} &= x_1 T_1^{sat} + x_2 T_2^{sat} \\ T_{awal} &= (0,7624)(78,2981) + (0,2376)(243,0309) \\ T_{awal} &= 117,4468 \text{ }^{\circ}\text{C} \end{aligned}$$

- 2) Menghitung P_1^{sat} dan P_2^{sat} dengan menggunakan nilai T trial awal, menggunakan persamaan *Antoine* (3.3) diperoleh:

$$P_1^{sat} \text{ calc} = 399,579 \text{ kPa}$$

$$P_2^{sat} \text{ calc} = 1,8616 \text{ kPa}$$

- 3) Menghitung nilai τ_{12} sebagai berikut :

Dengan $b_{12} = 1001,149 \text{ cal/mol}$, $b_{21} = 1061,763 \text{ cal/mol}$ pada persamaan (2.26) dan (2.27)

$$\tau_{12} = \frac{-814,544}{1,987 \left(\frac{\text{cal}}{\text{mol.K}} \right) \cdot 358,96 \text{ K}} = -1,04036$$

Dengan cara yang sama, diperoleh juga:

$$\tau_{21} = 1,4886$$

- 4) Menghitung G_{12} dan G_{21} dengan $\alpha = 0,4$ menggunakan persamaan (2.24) dan (2.25)

$$G_{12} = \exp(-0,4 \times -1,04036)$$

$$G_{12} = 1,7532$$

Dengan cara yang sama, diperoleh juga:

$$G_{21} = 0,5513$$

- 5) Menggunakan parameter biner NRTL dalam menghitung koefisien aktifitas (γ) menggunakan persamaan (2.22) dan (2.3):

$$\gamma_1(\text{calc})$$

$$= \exp \left(0,2376^2 \left[0,7631 \left(\frac{0,7369}{0,7624 + (0,2376)(0,7369)} \right)^2 + \left(\frac{(1,5217)(-1,0495)}{(0,2376 + (0,7624)(1,5217)^2)} \right) \right] \right)$$

$$\gamma_1(\text{calc}) = 0,976$$

$$\gamma_2(\text{calc})$$

$$= \exp \left(0,7624^2 \left[-1,0495 \left(\frac{1,52167}{0,2376 + (0,7624)(1,52167)} \right)^2 + \left(\frac{(0,7369)(0,7631)}{(0,7624 + (0,2376)(0,7369)^2)} \right) \right] \right)$$

$$\gamma_2(\text{calc}) = 01,644$$

- 6) Menghitung nilai P_j^{sat} dengan persamaan, dimana komponen j adalah komponen kunci. Ditetapkan komponen 1 sebagai komponen kunci, sebagai berikut:

$$P_j^{\text{sat}} = \frac{P}{\sum x_i \gamma_i (P_i^{\text{sat}} / P_j^{\text{sat}})}$$

$$P_j^{\text{sat}} = \frac{100,96}{((0,7624)(0,9807) + (0,2376)(0,7039))(1,8616/399,579)}$$

$$P_j^{\text{sat}} = 0,0042$$

- 7) Menghitung nilai T_{baru} yang baru dari parameter kunci:

$$T_{\text{baru}} (\text{°C}) = \frac{1592,864}{8,1122 - \log((134,90)(760/101,3)) - 226,184}$$

$$T_{\text{baru}} (\text{°C}) = 358,9672 \text{ K}$$

- 8) Jika $T_{\text{awal}} - T_{\text{baru}} < \text{error}$ yang ditetapkan, maka T_{baru} adalah T yang dicari lalu lanjut ke langkah selanjutnya. Jika $T_{\text{awal}} - T_{\text{baru}} > \text{error}$, maka ulangi perhitungan dari langkah 1, dengan menjadikan T_{baru} sebagai T untuk perhitungan RMSD T .

Syarat: toleransi nilai $\text{error } \Delta T < 0,001$

Dari percobaan ini, didapatkan nilai T konvergen pada:

$$T_{\text{awal}} = 85,7725 \text{ °C}$$

$$T_{\text{calc}} = 85,7725 \text{ °C}$$

$$AARD T = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T_{1,i,\text{cal}} - T_{1,i,\text{exp}}}{T_{1,i,\text{exp}}} \right| \times 100\% \quad | RMSD T$$

$$AARD T = 3,05 \%$$

- 9) Menghitung RMSD y dari nilai y_1 dan y_2 dengan persamaan

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{\text{sat}}}{P}$$

$$y_1 = \frac{x_1 \gamma_1 P_1^{\text{sat}}}{P} = \frac{(0,7634)(0,9780)(135,19)}{100,96}$$

$$y_1 = 0,9934 ; y_2 = 0,00066$$

$$AARD T = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T_{1,i,\text{cal}} - T_{1,i,\text{exp}}}{T_{1,i,\text{exp}}} \right| \times 100\% \quad |$$

$$RMSD y_1 = 2,69 \%$$

Dengan menggunakan langkah yang sama untuk data percobaan sistem biner yang lain

A.4.2 Perhitungan UNIQUAC

1. Data yang diketahui dari eksperimen:

Sistem biner etanol (1) + eugenol (2) untuk tekanan atmosfer

$$P = 100,96 \text{ kPa}$$

$$T = 84,464 \text{ °C}$$

$$x_1 = 0,9023 ; x_2 = 0,00976$$

$$y_1 = 0,9795$$

$$P_1^{\text{sat}} = 128,66 \text{ kPa}$$

2. Korelasi Persamaan Koefisien Aktifitas dengan Model Persamaan UNIQUAC

- 1) Menghitung koefisien aktifitas (γ_1) eksperimen dengan konstanta yang telah dihitung dengan persamaan :

$$\gamma_i(\text{eksperimen}) = \frac{y_i P}{x_i P_i^{\text{sat}}}$$

$$\gamma_1(\text{eksperimen}) = \frac{(0,097)(100,9)}{(0,902)(128,662)}$$

$$= 0,8517$$

Dengan cara yang sama didapatkan:

$$\gamma_2(\text{eksperimen}) = 53,1556$$

- 2) Parameter struktural

Tabel A. 5 Data Parameter Struktural (Polling, 2004)

Molekul		Main	Sec	Vk	Rk	Qk
Etanol (1)	CH ₃	1	1	1	0,9011	0,848
	CH ₂	1	2	1	0,6744	0,54
	OH	5	14	1	0,92	1,4
	CH ₃ O	13	24	1	1,145	1,088
	AC	3	10	1	0,3652	0,12
Eugenol (2)	ACOH	8	17	1	0,8952	0,68
	ACH	3	9	3	0,5313	0,4
	ACCH ₂	4	12	1	1,0396	0,66
	CH=CH ₂	2	5	1	1,3454	1,176

Kemudian menghitung nilai r, q, dan l , dimana nilai tersebut didapatkan melalui peramaan (2.47) dan (2.48)

$$r_i = \sum_k v_k^{(1)} R_k$$

$$q_i = \sum_k v_k^{(1)} Q_k$$

Dimana $v_k^{(1)}$ selaku bilangan bulat yang menunjukkan jumlah grup type k dalam suatu molekul i.(i=1 adalah etanol dan i=2 adalah eugenol)

$$l_i = 5(r_i - q_i) - (r_i - 1)$$

Daeri perhitungan diperoleh hasil seperti pada Tabel A.6

Tabel A. 6 Data Parameter Struktural r dan q

Komponen	r _i	q _i	l _i
Etanol (1)	2.576	2.588	-1.638
Eugenol(2)	6.3843	4.924	1.9172

*Dimana r = parameter volume komponen, q = parameter luasan komponen.

- 3) Mula-mula, mengasumsi nilai A₁₂ dan A₂₁ untuk suatu nilai sembarang, dimana pada awal perhitungan diasumsikan A₁₂ = 100 cal/mol dan A₂₁ = 50 cal/mol . Nantinya nilai parameter A₁₂ dan A₂₁ akan dicari dengan menggunakan nilai *objective function* (OF) yang paling minimum serta z sebesar 10.
- 4) Menghitung nilai φ₁ sebagai berikut:

Dengan, A₁₂ = 100 cal/mol dan A₂₁ = 50 cal/mol.

$$\varphi_i = \frac{x_i r_i}{x_1 r_1 + x_2 r_2}$$

$$\varphi_1 = \frac{x_1 r_1}{x_1 r_1 + x_2 r_2}$$

$$= \frac{(0,902)(2,576)}{(0,902)(2,576) + (0,097)(6,3843)}$$

$$\varphi_1 = 0.783$$

Dengan cara yang sama, didapatkan $\varphi_2 = 0.216$

- 5) Menghitung nilai θ_1 menurut persamaan (2.32) sebagai berikut:

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{x_1 q_1 + x_2 q_2}$$

$$\theta_1 = \frac{x_1 q_1}{x_1 q_1 + x_2 q_2} = \frac{(0.902)(2,588)}{(0,902)(2,588) + (0,097)(1,968)}$$

$$\theta_1 = 0,8396$$

Dengan cara yang sama, didapatkan $\theta_3 = 0,1603$

- 6) Menghitung nilai I_1 menurut persamaan (2.40) sebagai berikut:

$$I_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1)$$

$$I_1 = \frac{z}{2} (r_1 - q_1) - (r_1 - 1)$$

$$= \frac{10}{2} (2,576 - 2,588) - (2,576 - 1)$$

$$I_1 = -1,638$$

Dengan cara yang sama, didapatkan:

$$I_2 = 1,9172;$$

- 7) Menghitung nilai τ_{13} berdasarkan persamaan (2.34) dimana T menggunakan T hitungan sebagai berikut:

$$\tau_{ij} = \exp\left(-\frac{A_{ij}}{RT}\right)$$

$$\tau_{12} = \exp\left(-\frac{A_{12}}{RT}\right)$$

$$\tau_{12} = \exp\left(-\frac{100}{(1,986 \frac{cal}{mol \cdot K})(354,2515 K)}\right) = 2,13$$

Dengan cara yang sama, didapatkan $\tau_{21} = 0,594$

- 8) Parameter biner persamaan UNIQUAC menghitung koefisien aktifitas (γ) menurut persamaan (2.30) dan (2.31):

$$\ln \gamma_1 \text{calc} = \ln \frac{\varphi_1}{x_1} + \frac{z}{2} q_1 \ln \frac{\theta_1}{\varphi_1} + \varphi_3 \left(I_1 - \frac{r_1}{r_2} I_2 \right)$$

$$- q_1^l \ln(\theta_1^l + \theta_2^l \tau_{21})$$

$$+ \theta_2^l q_1^l \left(\frac{\tau_{21}}{\theta_1^l + \theta_2^l \tau_{21}} - \frac{\tau_{12}}{\theta_2^l + \theta_1^l \tau_{12}} \right)$$

$$\begin{aligned} \gamma_1 \text{calc} = & \exp \left(\ln \frac{\varphi_1}{x_1} + \frac{z}{2} q_1 \ln \frac{\theta_1}{\varphi_1} + \varphi_2 \left(I_1 - \frac{r_1}{r_2} I_2 \right) \right. \\ & - q_1^l \ln(\theta_1^l + \theta_2^l \tau_{21}) \\ & + \theta_2^l q_1^l \left(\frac{\tau_{31}}{\theta_1^l + \theta_2^l \tau_{21}} \right. \\ & \left. \left. - \frac{\tau_{13}}{\theta_3^l + \theta_1^l \tau_{12}} \right) \right) \end{aligned}$$

$$\gamma_1 \text{ calc} = 1,006$$

$$\begin{aligned} \ln \gamma_2 \text{calc} = & \ln \frac{\varphi_2}{x_2} + \frac{z}{2} q_2 \ln \frac{\theta_2}{\varphi_2} + \varphi_1 \left(I_2 - \frac{r_2}{r_1} I_1 \right) \\ & - q_2^l \ln(\theta_2^l + \theta_1^l \tau_{12}) \end{aligned}$$

$$+ \theta_1^l q_2^l \left(\frac{\tau_{12}}{\theta_2^l + \theta_1^l \tau_{12}} - \frac{\tau_{21}}{\theta_1^l + \theta_2^l \tau_{21}} \right)$$

$$\gamma_2 \text{ calc} = \exp \left(\ln \frac{\varphi_2}{x_2} + \frac{z}{2} q_2 \ln \frac{\theta_2}{\varphi_2} + \varphi_1 \left(I_2 - \frac{r_2}{r_1} I_1 \right) \right.$$

$$- q_2^l \ln (\theta_2^l + \theta_1^l \tau_{12})$$

$$+ \theta_1^l q_2^l \left(\frac{\tau_{13}}{\theta_2^l + \theta_1^l \tau_{12}} \right.$$

$$\left. \left. - \frac{\tau_{31}}{\theta_1^l + \theta_2^l \tau_{21}} \right) \right)$$

$$\gamma_2 \text{ calc} = 0,559$$

- 9) Setelah diperoleh nilai γ_1 dan γ_2 eksperimen maupun secara perhitungan untuk masing-masing komposisi x_1 , maka langkah selanjutnya adalah menghitung OF dengan persamaan:

$$OF = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \left[\left(\frac{\gamma_j^{exp} - \gamma_j^{cal}}{\gamma_j^{exp}} \right) \right]^2$$

$$OF = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\gamma_1^{eksperimen} - \gamma_1^{calc}}{\gamma_1^{eksperimen}} \right)^2$$

$$+ \left(\frac{\gamma_3^{eksperimen} - \gamma_3^{calc}}{\gamma_3^{eksperimen}} \right)^2$$

Nilai OF yang diperoleh adalah 3,97.

- 10) Selanjutnya mengiterasi nilai OF tersebut terhadap A_{12} dan A_{21} dari asumsi awal, sehingga didapatkan nilai sekecil mungkin. Dengan menggunakan *Solver* yang terdapat pada Microsoft Excel, sehingga diperoleh:

OF	= 0,767
A_{12}	= -532,295 cal/mol

$$A_{21} = 366,025 \text{ cal/mol}$$

3. Perhitungan Prediksi T-x-y BUBLE T untuk Kesetimbangan Uap Cair

Dari parameter biner yang diperoleh dari perhitungan diatas akan diprediksi kurva T-x-y. Langkah-langkah perhitungan BUBLE T adalah sebagai berikut:

- 1) Menghitung nilai awal T untuk *trial* dengan persamaan:

$$T = \sum x_i T_i^{sat}$$

$$T = x_1 T_1^{sat} + x_2 T_2^{sat}$$

$$T = (0,902)(78.298 \text{ } ^\circ C) + (0,097)(243,03 \text{ } ^\circ C)$$

$$T = 94,37 \text{ } ^\circ C$$

- 2) Menghitung P_1^{sat} dan P_2^{sat} dengan menggunakan nilai T yang baru, dengan menggunakan persamaan Antoine diperoleh:

$$P_1^{sat} \text{ calc} = 184,521 \text{ kPa}$$

$$P_2^{sat} \text{ calc} = 0,654 \text{ kPa}$$

- 3) Menghitung γ_i untuk masing-masing komponen dengan menggunakan UNIQUAC dengan parameter biner yang didapat:

$$\gamma_1 = 1,007$$

$$\gamma_2 = 0,599$$

- 4) Menghitung nilai P_j^{sat} dengan persamaan, dimana komponen j adalah komponen kunci. Ditetapkan komponen 2 sebagai komponen kunci, sebagai berikut:

$$P_j^{sat} = \frac{P}{\sum x_i \gamma_i (P_i^{sat} / P_j^{sat})}$$

$$P_j^{sat} = 111,48 \text{ kPa}$$

- 5) Menghitung nilai T_{baru} yang baru dari parameter kunci:

$$T_i^{sat} = \frac{B_i}{A_i - \ln P} - C_i$$

$$T_{baru} = 80,73 \text{ } ^\circ\text{C}$$

- 6) Jika $T_{awal} - T_{baru} < error$ yang ditetapkan, maka T_{baru} adalah T yang dicari, dan lanjut ke langkah 7 (selanjutnya), jika $T_{awal} - T_{baru} > error$, maka ulangi perhitungan dari langkah 1, dengan menjadikan T_{baru} sebagai T untuk perhitungan dengan perhitungan RMSD T :

Syarat: toleransi nilai $error \Delta T < 0.001$

Dari percobaan ini didapatkan nilai T *konvergen* pada:

$$T_{awal} = 94,37 \text{ } ^\circ\text{C}, \text{ maka}$$

$$T_{calc} = 80,69 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$AARD \ T = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T_{1,i,cal} - T_{1,i,exp}}{T_{1,i,exp}} \right| \times 100\%$$

$$AARD \ T = 1,417 \%$$

- 7) Menghitung RMSD y dari nilai y_1 dan y_2 dengan persamaan:

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{P}$$

$$y_1 = \frac{x_1 \gamma_1 P_1^{sat}}{P} = \frac{(0.902)(1.0042)(111.31 \text{ kPa})}{(100,9 \text{ kPa})}$$

$$y_1 = 0.9998 ; y_2 = 0.0002$$

$$AARD \ T = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T_{1,i,cal} - T_{1,i,exp}}{T_{1,i,exp}} \right| \times 100\%$$

AARD T = 1,732 %

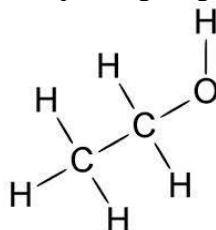
- 8) Dengan menggunakan langkah yang sama untuk data percobaan tekanan yang lain

A.5. Perhitungan Prediksi Kesetimbangan dengan metode UNIFAC

Prediksi kesetimbangan Uap Cair sistem biner etanol(1)+eugenol(2) pada tekanan 400 mmHg dan tekanan atmosfer dihitung dengan metode UNIFAC, sebagai berikut:

1. UNIFAC Group-Group Identification

- a. Rumus bangun dan pembagian group Etanol

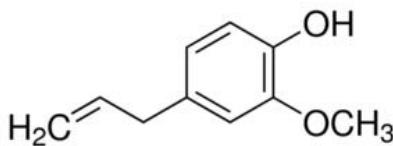


Gambar A. 3 Rumus Bangun Etanol

Tabel A. 7 Group Identification Etanol

Group Identification			Vk	Rk	Qk
Nama	Main	Secondary			
CH ₃	1	1	1	0,9011	0,848
CH ₂	1	2	1	0,6744	0,54
OH	5	14	1	0,92	1,4

- b. Rumus bangun dan pembagian group Eugenol



Gambar A. 4 Rumus Bangun Eugenol

Tabel A. 8 Group Identification Eugenol

Group Identification			Vk	Rk	Qk
Nama	Main	Secondary			
CH ₃ O	13	24	1	1,145	1,088
AC	3	10	1	0,3652	0,12
ACOH	8	17	1	0,8952	0,68
ACH	3	9	3	0,5313	0,4
ACCH ₂	4	12	1	1,0396	0,66
CH=CH ₂	2	5	1	1,3454	1,176

Keterangan :

- Vk = Jumlah spesi yang memiliki group sejenis
- Rk = Group Volume Parameter
- Qk = Group Area Parameter

2. UNIFAC Group-Group Interaction Parameter, a_{mk}

Main group yang ada pada sistem ini adalah : 13, 8, 4 3, 2, 1, 5 .

Sehingga dapat dibuat kombinasi a_{mn} sebagai berikut :

$$\begin{array}{llllll}
 a(13,3) & = & 52,13 & a(3,8) & = & 1329 & a(8,4) & = & 244,2 \\
 a(3,13) & = & 32,14 & a(8,3) & = & 25,34 & a(4,8) & = & 884,9 \\
 a(13,8) & = & -178,5 & a(3,4) & = & 167 & a(8,2) & = & 217,5
 \end{array}$$

$$\begin{array}{llllll}
a(8,13) & = & -162,9 & a(4,3) & = & -146,8 \\
a(13,4) & = & 65,69 & a(3,2) & = & 3,446 \\
a(4,13) & = & 213,1 & a(2,3) & = & 38,81 \\
a(13,2) & = & 26,51 & a(3,1) & = & -11,12 \\
a(2,13) & = & 214,5 & a(1,3) & = & 61,13 \\
a(13,1) & = & 83,36 & a(3,5) & = & 636,1 \\
a(1,13) & = & 251,5 & a(5,3) & = & 89,6 \\
a(13,5) & = & 237,7 \\
a(5,13) & = & 28,06
\end{array}$$

$$\begin{array}{llllll}
a(4,2) & = & -113,6 & a(2,1) & = & -35,36 \\
a(2,4) & = & 74,15 & a(1,2) & = & 86,02 \\
a(4,1) & = & -69,7 & a(2,5) & = & 524,1 \\
a(1,4) & = & 76,5 & a(5,2) & = & 457 \\
a(4,5) & = & 803,2 \\
a(5,4) & = & 25,82
\end{array}$$

3. Persamaan Metode UNIFAC

Persamaan yang digunakan untuk memprediksi data kesetimbangan Uap-Cair pada tekanan konstan yakni persamaan (2.41) adalah sebagai berikut :

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R$$

Dimana kombinasi $\ln \gamma_i^C$ dihitung menurut persamaan (2.42) sebagai berikut

$$\begin{aligned}\ln \gamma_i^C &= \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i \\ &\quad - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j\end{aligned}$$

Selanjutnya θ_i dan Φ_i dihitung menggunakan persamaan (2.45) dan (2.46) sebagai berikut

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j}$$

$$\Phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j}$$

Untuk bagian residual $\ln \gamma_i^R$ dapat dihitung dengan menggunakan persamaan (2.49) di bawah ini:

$$\begin{aligned}\ln \gamma_i^R &= \sum_k v_k^{(i)} \left(\ln \Gamma_k \right. \\ &\quad \left. - \ln \Gamma_k^{(1)} \right)\end{aligned}$$

Menggunakan persaman (2.50) seperti dibawah

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \frac{\theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \theta_n \Psi_{nm}} \right]$$

Nilai θ_m dicari menggunakan persamaan (2.51) seperti dibawah

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n}$$

$$X_j(i) = \frac{V_j^i}{\sum V_k^i}$$

$$X_m = \frac{\sum_j v_m^{(j)} x_j}{\sum_j \sum_n v_n^{(j)} x_j}$$

Untuk Ψ_{mn} dicari menggunakan persamaan (2.53) seperti dibawah

$$\Psi_{mn} = \exp \left(-\frac{a_{mn}}{T} \right)$$

dimana untuk menghitung harga l_i , q_i , dan r_i menggunakan persamaan (2.43), (2.47), dan (2.48) sebagai berikut :

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1)$$

Z=10 (ditetapkan)

$$r_i = \sum_k v_k^{(1)} R_k$$

$$q_i = \sum_k v_k^{(1)} Q_k$$

4. Menghitung Koefisien Aktivitas Combinatorial

Menghitung koefisien aktivitas *combinatorial* *Isepertipada* seperti pada persamaan (ii). Dengan menggunakan persamaan (xii), (xiii), (xi), (iii), (iv) serta menggunakan data v_k , R_k , dan Q_k dari poin 1 dan 2 diatas untuk sistem Etanol(1) + Eugenol (2) akan didapatkan data sebagai berikut :

r_1	r_2	q_1	q_2	l_1	l_2
2,4955	6,3843	2,788	4,924	-2,958	1,917
θ_1	θ_2	Φ_1	Φ_2	θ_1	θ_2
0,0202	0,9798	0,0416	0,9584	0,0202	0,9798

Dari data diatas, dapat dicari $\ln \gamma_1^C$ dan $\ln \gamma_2^C$ menggunakan pers.

(ii) dengan menetapkan $x_1=0,1$ dan tekanan konstan = 760

mmHg didapatkan hasil berikut :

$$\ln \gamma_{11}^C = 0,4781$$

$$\ln \gamma_{12}^C = 0,0022$$

5. Koefisien Aktivitas Residual

Selanjutnya adalah menghitung koefisien aktivitas *residual*.

Perhitungan dimulai

dengan menentukan T_{trial} dan menghitung $\psi(m,n)$ menggunakan persamaan (x). T_{trial} yang digunakan pada perhitungan ini adalah 415,57 K. Contoh perhitungannya adalah sebagai berikut :

$$\Psi_{mn} = \exp\left(-\frac{a_{mn}}{T}\right)$$

$$\Psi_{13,3} = \exp\left(-\frac{a_{13,3}}{T}\right)$$

$$\Psi_{13,3} = \exp\left(-\frac{52,13}{415,57}\right)$$

$$\Psi_{13,3} = 0,8908$$

Dengan cara yang sama, didapatkan :

$$\psi(13,3) = 0,8821 \quad \psi(3,8) = 0,0408 \quad \psi(8,4) = 0,5557$$

$$\psi(3,13) = 0,9256 \quad \psi(8,3) = 0,9408 \quad \psi(4,8) = 0,1189$$

$$\psi(13,8) = 1,5365 \quad \psi(3,4) = 0,6691 \quad \psi(8,2) = 0,5925$$

$\psi(8,13)$	=	1,4799	$\psi(4,3)$	=	1,4237	$\psi(2,8)$	=	0,2820
$\psi(13,4)$	=	0,8538	$\psi(3,2)$	=	0,9917	$\psi(8,1)$	=	0,5150
$\psi(4,13)$	=	0,5988	$\psi(2,3)$	=	0,9108	$\psi(1,8)$	=	0,0405
$\psi(13,2)$	=	0,9382	$\psi(3,1)$	=	1,0271	$\psi(8,5)$	=	2,9644
$\psi(2,13)$	=	0,5968	$\psi(1,3)$	=	0,8632	$\psi(5,8)$	=	1,8681
$\psi(13,1)$	=	0,8182	$\psi(3,5)$	=	0,2164			
$\psi(1,13)$	=	0,5460	$\psi(5,3)$	=	0,8061			
$\psi(13,5)$	=	0,5644						
$\psi(5,13)$	=	0,9347						
$\psi(4,2)$	=	1,3144	$\psi(2,1)$	=	1,0888	$\psi(1,5)$	=	0,0931
$\psi(2,4)$	=	0,8366	$\psi(1,2)$	=	0,8130	$\psi(5,1)$	=	0,6864
$\psi(4,1)$	=	1,1826	$\psi(2,5)$	=	0,2833			
$\psi(1,4)$	=	0,8319	$\psi(5,2)$	=	0,3330			
$\psi(4,5)$	=	0,1448						
$\psi(5,4)$	=	0,9398						

Kemudian menghitung properti residual untuk masing-masing komponen murni. Dimisalkan :

Etanol
 CH_3 = 1'1

$$\begin{array}{ll} \text{CH}_2 & = 1'2 \\ \text{OH} & = 1'3 \end{array}$$

Eugenol

$$\begin{array}{ll} \text{CH}_3\text{O} & = 13 \\ \text{AC} & = 3'10 \\ \text{ACOH} & = 8 \\ \text{ACH} & = 3'9 \\ \text{ACCH}_2 = 4 & \\ \text{CH}=\text{CH}_2 & = 2'5 \end{array}$$

a) Etanol Murni

Senyawa Etanol memiliki 3 gugus grup UNIFAC yang berbeda-beda, yaitu CH₃, CH₂, OH. Sehingga akan dicari {X1'1(1), X1'2(1), X5'(1)} menggunakan persamaan (viii). Selanjutnya akan dihitung $\square k(1)$ dan $\ln \square k(1)$ untuk masing-masing gugus menggunakan persamaan (vi) dan (vii). Contoh perhitungannya adalah sebagai berikut :

- **Menghitung Xk(1)**

$$X_{1,1}(1) = \frac{V_{1,1}^{(1)}}{\sum V_k^{(1)}}$$

$$X_{1,1}(1) = \frac{1}{(1 + 1 + 1)}$$

$$X_{1,1}(1) = 0,333$$

Dengan cara yang sama, didapatkan :

$$X1'1(1) = 0,3333$$

$$X1'2(1) = 0,3333$$

$$X5(1) = 0,3333$$

- **Menghitung $\theta_{k(1)}$**

$$\theta_{1'1}^{(1)} = \frac{Q_{1'1} X_{1'1}^{(1)}}{\sum_n Q_n X_n^{(1)}}$$

$$\theta_{1'1}^{(1)} = \frac{0,848 \times 0,3333}{(0,848 \times 0,3333 + 0,54 \times 0,3333 + 1,4 \times 0,3333)}$$

$$\theta_{1'1}^{(1)} = 0,3042$$

Dengan cara yang sama, didapatkan :

$$\theta_{1'1}(1) = 0,3042$$

$$\theta_{1'2}(1) = 0,1936$$

$$\theta_{5}(1) = 0,5022$$

- **Menghitung $\ln \Gamma_k(1)$**

$$\ln \Gamma_{1'1}^{(1)} = Q_{1'1} \left\{ \begin{aligned} & 1 - \ln \left(\theta_{1'1}^{(1)} \psi_{1'1} + \theta_{1'2}^{(1)} \psi_{1'1} + \theta_5^{(1)} \psi_{5'1} \right) \\ & - \left[\begin{aligned} & \left(\frac{\theta_{1'1}^{(1)} \psi_{1'1}}{\theta_{1'1}^{(1)} \psi_{1'1} + \theta_{1'2}^{(1)} \psi_{1'1} + \theta_5^{(1)} \psi_{5'1}} \right) \\ & + \left(\frac{\theta_{1'2}^{(1)} \psi_{1'1}}{\theta_{1'1}^{(1)} \psi_{1'1} + \theta_{1'2}^{(1)} \psi_{1'1} + \theta_5^{(1)} \psi_{5'1}} \right) \\ & + \left(\frac{\theta_5^{(1)} \psi_{5'5}}{\theta_{1'1}^{(1)} \psi_{1'5} + \theta_{1'2}^{(1)} \psi_{1'5} + \theta_5^{(1)} \psi_{5'5}} \right) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right\}$$

$$\ln \Gamma_{1'1}^{(1)} = -0,0987$$

Semua persamaan untuk menghitung $\ln \Gamma_{1'1}(1)$, $\ln \Gamma_{1'2}(1)$, $\ln \Gamma_5(1)$ diturunkan dari persamaan (vi). Hasil perhitungan $\ln \Gamma_{1'1}(1)$, $\ln \Gamma_{1'2}(1)$, $\ln \Gamma_5(1)$ adalah sebagai berikut :

$$\ln \Gamma 1'1(1) = 0,4199$$

$$\ln \Gamma 1'2(1) = 0,2674$$

$$\ln \Gamma 5(1) = 0,3913$$

b) Eugenol Murni

Gugus yang dimiliki Eugenol adalah CH₃O, AC, ACOH, ACH, ACCH₂, dan CH=CH₂. Sehingga akan dihitung X13(2), X3'10(2), X8(2), X3'9(2), X4(2), dan X2'5(2).

Perhitungan dilakukan dengan cara yang sama seperti perhitungan untuk etanol murni. Hasil perhitungannya adalah sebagai berikut :

• **Hasil Perhitungan Xk(2)**

$$X3'10(2) = 0,125$$

$$X8(2) = 0,125$$

$$X3'9(2) = 0,375$$

$$X4(2) = 0,125$$

$$X2'5(2) = 0,125$$

• **Hasil Perhitungan θk(2)**

$$\theta 3'10(2) = 0,0244$$

$$\theta 8(2) = 0,1381$$

$$\theta 3'9(2) = 0,2437$$

$$\theta 4(2) = 0,1340$$

$$\theta 2'5(2) = 0,2388$$

- **Hasil Perhitungan $\ln \Gamma_k(2)$**

$$\ln \Gamma_3'10(2) = -0,1330$$

$$\ln \Gamma_3'10(2) = -0,0203$$

$$\ln \Gamma_8(2) = 0,3199$$

$$\ln \Gamma_3'9(2) = -0,0677$$

$$\ln \Gamma_4(2) = 0,0581$$

$$\ln \Gamma_2'5(2) = 0,2934$$

- c) **Residual Group Activity Coefficient**

Pada langkah ini, dihitung kembali X_k , θ_k , dan $\ln \Gamma_k$ untuk tiap grup. Besaran yang dihitung pada langkah ini adalah :

- $X_1'1, X_1'2, X_5, X_{13}, X_3'10, X_8, X_3'9, X_4, X_2$
- $\theta_1'1, \theta_1'2, \theta_5, \theta_{13}, \theta_3'10, \theta_8, \theta_3'9, \theta_4, \theta_2$
- $\ln \Gamma_1'1, \ln \Gamma_1'2, \ln \Gamma_5, \ln \Gamma_{13}, \ln \Gamma_3'10, \ln \Gamma_8, \ln \Gamma_3'9, \ln \Gamma_4, \ln \Gamma_2'5$

- **Hasil Perhitungan X_k**

Nilai X_k dihitung berdasarkan persamaan (ix). Hasil perhitungannya adalah sebagai berikut

$$X_{13} = 0,1200$$

$$X_3'10 = 0,1200$$

$$X_8 = 0,1200$$

$$X_3'9 = 0,3600$$

$$X_4 = 0,1200$$

$$X_2'5 = 0,1200$$

$$X_1'1 = 0,0133$$

$$X_1'2 = 0,0133$$

$$X_5 = 0,013$$

- **Hasil Perhitungan θ_k**

Besaran θ_k dihitung menggunakan persamaan (vii) sama seperti pada perhitungan $\theta_k(1)$ dan $\theta_k(2)$. Hasil perhitungannya adalah sebagai berikut :

$$\theta_{13} = 0,2078$$

$$\theta_{3'10} = 0,0229$$

$$\theta_8 = 0,1299$$

$$\theta_{3'9} = 0,2292$$

$$\theta_4 = 0,1261$$

$$\theta_{2'5} = 0,2246$$

$$\theta_{1'1} = 0,0180$$

$$\theta_{1'2} = 0,01$$

- **Hasil Perhitungan $\ln \Gamma_k$**

Persamaan untuk menghitung $\ln \Gamma_k$ untuk masing-masing grup diturunkan dari persamaan (vi), seperti pada perhitungan $\ln \Gamma_k(1)$ dan $\ln \Gamma_k(2)$. Hasil perhitungannya disajikan dibawah ini :

$$\ln \Gamma_{13} = -0,0901$$

$$\ln \Gamma_{3'10} = 0,0167$$

$$\ln \Gamma_8 = 0,2564$$

$$\ln \Gamma_{3'9} = 0,0556$$

$$\ln \Gamma_4 = 0,1250$$

$$\ln \Gamma_{2'5} = 0,2150$$

$$\ln \Gamma_{1'1} = 0,2775$$

$$\ln \Gamma_{1'2} = 0,1767$$

$$\ln \Gamma_5 = 0,4103$$

- **Residual Activity Coefficient**

$\ln \gamma_k^R$ dihitung menggunakan persamaan (v).

$$\ln \gamma_1^R = -0,0024$$

$$\ln \gamma_2^R = 0,8900$$

6. Activity Coefficient Total

$$\begin{aligned}\ln \gamma_1 &= \ln \gamma_1^C + \ln \gamma_1^R \\ \ln \gamma_1 &= 0,4781 + (-0,0024) \\ \ln \gamma_1 &= -0,0002\end{aligned}$$

Dengan cara yang sama,

$$\begin{aligned}\ln \gamma_2 &= 1,3681 \\ \gamma_1 &= 0,9998 \\ \gamma_2 &= 3,9280\end{aligned}$$

7. BUBL T Calculation

1) Menghitung P1sat dan P2sat

Parameter Antoine Etanol dan Eugenol:

Etanol			Eugenol		
A	B	C	A	B	C
16,6758	3674,49	226,45	4,9514	2390,79	-32,7785

$$\ln(P1sat) = A - \frac{B}{(T + C)}$$

$$\ln(P1sat) = 16,6748 - \frac{3674,49}{(402,87 + (177,47))}$$

$$P1sat = 8,2431 \text{ bar}$$

Dengan cara yang sama,

$$\log(P2sat) = A - \frac{B}{(T + C)}$$

$$\log(P2sat) = 4,9514 - \frac{2390,79}{(450,612 + (-32,7785))}$$

$$P2sat = 0,0508 \text{ bar}$$

2) Menghitung Alpha dan P1sat baru

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{P1sat}{P2sat} \\ \alpha &= 162,2401 \\ P1sat \text{ new} &= \frac{P}{x_1\gamma_1 + \frac{x_2\gamma_2}{\alpha}} \\ P1sat \text{ new} &= 8,1358 \text{ bar}\end{aligned}$$

3) T baru

$$T = \left(\frac{B1}{A1 - \ln P1sat\ new} - C1 \right) + 273,15$$

$$T = \left(\frac{2390,79}{16,6758 - \ln(2,01413x101,32)} - (226,45) \right) + 273,15$$

$$T = 415,58 \text{ K}$$

4) Delta T

$$\delta T = T_{\text{trial}} - T_{\text{baru}}$$

$$\delta T = 415,578 - 415,58$$

$$\delta T = -0,000006 \text{ K}$$

5) Iterasi

Menggunakan program *Goal Seek* pada Ms. Excel dengan menetapkan delta T = 0, didapatkan untuk x1=0,1 suhu T = 415,58 K. Di dapatkan

$$\gamma_1 \text{ baru} = 1,2904$$

$$\gamma_2 \text{ baru} = 1,0235$$

$$P1 \text{ sat baru} = 8,1358$$

6) Menghitung y1

$$y1 = \frac{x1 \gamma_1 P1 \text{ sat new}}{P}$$

$$y1 = \frac{0,1 \times 1,2904 \times 8,1358}{1,096}$$

$$y1 = 0,9578$$

Data hasil perhitungan prediksi disajikan pada Tabel A. 9 dan A. 10

Tabel A. 9 Perhitungan Kesetimbangan Uap Cair Etanol (1) + Eugenol (2) pada Tekanan 400mmHg

x ₁	y ₁	T (°C)	x ₁	y ₁	T (°C)	x ₁	y ₁	T (°C)
0	0,0000	217,239	0,14	0,9785	109,494	0,28	0,9924	90,675
0,005	0,4006	198,827	0,145	0,9796	108,503	0,285	0,9926	90,217
0,01	0,5965	185,571	0,15	0,9805	107,550	0,29	0,9928	89,768
0,015	0,7062	175,534	0,155	0,9814	106,630	0,295	0,9930	89,329
0,02	0,7741	167,595	0,16	0,9822	105,744	0,3	0,9932	88,897
0,025	0,8194	161,097	0,165	0,9830	104,887	0,305	0,9934	88,475
0,03	0,8512	155,639	0,17	0,9837	104,060	0,31	0,9935	88,060
0,035	0,8746	150,956	0,175	0,9844	103,259	0,315	0,9937	87,653
0,04	0,8924	146,872	0,18	0,9850	102,483	0,32	0,9939	87,253
0,045	0,9064	143,261	0,185	0,9856	101,731	0,325	0,9940	86,861
0,05	0,9175	140,032	0,19	0,9862	101,001	0,33	0,9942	86,476
0,055	0,9266	137,118	0,195	0,9867	100,293	0,335	0,9943	86,098
0,06	0,9341	134,466	0,2	0,9872	99,605	0,34	0,9945	85,726
0,065	0,9404	132,036	0,205	0,9877	98,936	0,345	0,9946	85,361
0,07	0,9457	129,796	0,21	0,9881	98,285	0,35	0,9947	85,002
0,075	0,9503	127,721	0,215	0,9885	97,651	0,355	0,9949	84,649
0,08	0,9543	125,789	0,22	0,9889	97,034	0,36	0,9950	84,303
0,085	0,9578	123,983	0,225	0,9893	96,432	0,365	0,9951	83,962
0,09	0,9608	122,288	0,23	0,9896	95,845	0,37	0,9952	83,626
0,095	0,9635	120,693	0,235	0,9900	95,273	0,375	0,9953	83,296
0,1	0,9660	119,187	0,24	0,9903	94,714	0,38	0,9954	82,972
0,105	0,9681	117,761	0,245	0,9906	94,169	0,385	0,9955	82,652
0,11	0,9701	116,408	0,25	0,9909	93,636	0,39	0,9956	82,338
0,115	0,9718	115,120	0,255	0,9912	93,115	0,395	0,9957	82,029
0,12	0,9734	113,893	0,26	0,9914	92,605	0,4	0,9958	81,724
0,125	0,9749	112,721	0,265	0,9917	92,107	0,405	0,9959	81,425
0,13	0,9762	111,600	0,27	0,9919	91,620	0,41	0,9960	81,130
0,135	0,9774	110,526	0,275	0,9922	91,142	0,415	0,9961	80,839

Tabel A. 9 Perhitungan Kesetimbangan Uap Cair Etanol (1) + Eugenol (2) pada Tekanan 400mmHg

x ₁	y ₁	T (°C)	x ₁	y ₁	T (°C)	x ₁	y ₁	T (°C)
0,42	0,9962	80,553	0,565	0,9978	73,819	0,71	0,9987	69,264
0,425	0,9963	80,271	0,57	0,9979	73,631	0,715	0,9987	69,135
0,43	0,9963	79,993	0,575	0,9979	73,446	0,72	0,9988	69,008
0,435	0,9964	79,720	0,58	0,9980	73,263	0,725	0,9988	68,882
0,44	0,9965	79,450	0,585	0,9980	73,083	0,73	0,9988	68,758
0,445	0,9966	79,185	0,59	0,9980	72,905	0,735	0,9988	68,635
0,45	0,9966	78,923	0,595	0,9981	72,730	0,74	0,9989	68,514
0,455	0,9967	78,665	0,6	0,9981	72,556	0,745	0,9989	68,394
0,46	0,9968	78,411	0,605	0,9981	72,385	0,75	0,9989	68,276
0,465	0,9968	78,160	0,61	0,9982	72,217	0,755	0,9989	68,159
0,47	0,9969	77,913	0,615	0,9982	72,050	0,76	0,9989	68,043
0,475	0,9970	77,670	0,62	0,9982	71,886	0,765	0,9990	67,929
0,48	0,9970	77,430	0,625	0,9983	71,724	0,77	0,9990	67,816
0,485	0,9971	77,193	0,63	0,9983	71,564	0,775	0,9990	67,704
0,49	0,9971	76,959	0,635	0,9983	71,406	0,78	0,9990	67,593
0,495	0,9972	76,729	0,64	0,9984	71,250	0,785	0,9990	67,484
0,5	0,9972	76,502	0,645	0,9984	71,096	0,79	0,9991	67,376
0,505	0,9973	76,279	0,65	0,9984	70,944	0,795	0,9991	67,268
0,51	0,9974	76,058	0,655	0,9984	70,794	0,8	0,9991	67,162
0,515	0,9974	75,840	0,66	0,9985	70,646	0,805	0,9991	67,057
0,52	0,9975	75,625	0,665	0,9985	70,499	0,81	0,9991	66,953
0,525	0,9975	75,414	0,67	0,9985	70,355	0,815	0,9991	66,850
0,53	0,9975	75,205	0,675	0,9985	70,212	0,82	0,9992	66,748
0,535	0,9976	74,998	0,68	0,9986	70,072	0,825	0,9992	66,646
0,54	0,9976	74,795	0,685	0,9986	69,933	0,83	0,9992	66,546
0,545	0,9977	74,595	0,69	0,9986	69,796	0,835	0,9992	66,446
0,55	0,9977	74,397	0,695	0,9986	69,660	0,84	0,9992	66,347
0,555	0,9978	74,201	0,7	0,9987	69,527	0,845	0,9993	66,248
0,56	0,9978	74,009	0,705	0,9987	69,394	0,85	0,9993	66,151

**Tabel A. 9 Perhitungan Kesetimbangan Uap Cair
Etanol (1) + Eugenol (2) pada
Tekanan 400mmHg**

x₁	y₁	T (°C)	x₁	y₁	T (°C)
0,855	0,99930	66,054	0,93	0,99960	64,629
0,86	0,99932	65,957	0,935	0,99962	64,534
0,865	0,99933	65,861	0,94	0,99965	64,437
0,87	0,99935	65,765	0,945	0,99967	64,340
0,875	0,99937	65,670	0,95	0,99970	64,242
0,88	0,99939	65,575	0,955	0,99972	64,143
0,885	0,99941	65,481	0,96	0,99975	64,043
0,89	0,99943	65,386	0,965	0,99978	63,942
0,895	0,99945	65,292	0,97	0,99980	63,840
0,9	0,99947	65,198	0,975	0,99983	63,737
0,905	0,99949	65,103	0,98	0,99986	63,632
0,91	0,99951	65,009	0,985	0,99990	63,525
0,915	0,99953	64,915	0,99	0,99993	63,417
0,92	0,99956	64,820	0,995	0,99996	63,307
0,925	0,99958	64,725	1	1,00000	63,194

**Tabel A. 10 Perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair
Etanol (1) + Eugenol (2) pada
Tekanan Atmosfer**

x ₁	y ₁	T (°C)	x ₁	y ₁	T (°C)	x ₁	y ₁	T (°C)
0	0,000	243	0,14	0,9740	129,0	0,28	0,9907	108,2
0,005	0,358	225	0,145	0,9752	127,9	0,285	0,9909	107,7
0,01	0,550	211,6	0,15	0,9764	126,8	0,29	0,9912	107,2
0,015	0,665	201,2	0,155	0,9774	125,8	0,295	0,9914	106,8
0,02	0,738	192,7	0,16	0,9784	124,8	0,3	0,9917	106,3
0,025	0,788	185,8	0,165	0,9794	123,9	0,305	0,9919	105,8
0,03	0,824	179,9	0,17	0,9802	123,0	0,31	0,9921	105,4
0,035	0,851	174,7	0,175	0,9810	122,1	0,315	0,9923	104,9
0,04	0,872	170,3	0,18	0,9818	121,2	0,32	0,9925	104,5
0,045	0,888	166,3	0,185	0,9825	120,4	0,325	0,9927	104,1
0,05	0,901	162,8	0,19	0,9832	119,6	0,33	0,9929	103,6
0,055	0,911	159,5	0,195	0,9838	118,8	0,335	0,9930	103,2
0,06	0,920	156,6	0,2	0,9844	118,0	0,34	0,9932	102,8
0,065	0,928	153,9	0,205	0,9850	117,3	0,345	0,9934	102,4
0,07	0,934	151,4	0,21	0,9855	116,6	0,35	0,9935	102,0
0,075	0,940	149,1	0,215	0,9860	115,9	0,355	0,9937	101,6
0,08	0,944	147,0	0,22	0,9865	115,2	0,36	0,9938	101,3
0,085	0,949	145,0	0,225	0,9869	114,5	0,365	0,9940	100,9
0,09	0,952	143,1	0,23	0,9873	113,9	0,37	0,9941	100,5
0,095	0,955	141,4	0,235	0,9878	113,3	0,375	0,9942	100,2
0,1	0,958	139,7	0,24	0,9881	112,7	0,38	0,9944	99,8
0,105	0,961	138,1	0,245	0,9885	112,1	0,385	0,9945	99,52
0,11	0,963	136,6	0,25	0,9889	111,5	0,39	0,9946	99,18
0,115	0,965	135,2	0,255	0,9892	110,9	0,395	0,9947	98,84
0,12	0,967	133,8	0,26	0,9895	110,3	0,4	0,9949	98,51
0,125	0,969	132,5	0,265	0,9898	109,8	0,405	0,9950	98,18
0,13	0,971	131,3	0,27	0,9901	109,3	0,41	0,9951	97,86
0,135	0,972	130,1	0,275	0,9904	108,7	0,415	0,9952	97,55

**Tabel A. 10 Perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair
Etanol (1) + Eugenol (2) pada
Tekanan Atmosfer**

x ₁	y ₁	T (°C)	x ₁	y ₁	T (°C)	x ₁	y ₁	T (°C)
0,42	0,9953	97,2	0,565	0,9973	89,98	0,71	0,9984	85,1
0,425	0,9954	96,9	0,57	0,9974	89,77	0,715	0,9984	84,9
0,43	0,9955	96,6	0,575	0,9974	89,58	0,72	0,9984	84,8
0,435	0,9956	96,3	0,58	0,9974	89,38	0,725	0,9985	84,7
0,44	0,9957	96,0	0,585	0,9975	89,19	0,73	0,9984	84,5
0,445	0,9957	95,7	0,59	0,9975	89,00	0,735	0,9985	84,4
0,45	0,9958	95,4	0,595	0,9976	88,81	0,74	0,9985	84,3
0,455	0,9959	95,1	0,6	0,9976	88,62	0,745	0,9986	84,2
0,46	0,9960	94,9	0,605	0,9977	88,44	0,75	0,9986	84,0
0,465	0,9961	94,6	0,61	0,9977	88,26	0,755	0,9986	83,9
0,47	0,9961	94,3	0,615	0,9977	88,08	0,76	0,9986	83,8
0,475	0,9962	94,1	0,62	0,9978	87,91	0,765	0,9987	83,7
0,48	0,9963	93,8	0,625	0,9978	87,73	0,77	0,9987	83,5
0,485	0,9964	93,6	0,63	0,9979	87,56	0,775	0,9987	83,4
0,49	0,9964	93,3	0,635	0,9979	87,40	0,78	0,9987	83,3
0,495	0,9965	93,1	0,64	0,9979	87,23	0,785	0,9988	83,2
0,5	0,9966	92,84	0,645	0,9980	87,07	0,79	0,9988	83,1
0,505	0,9966	92,6	0,65	0,9980	86,90	0,795	0,9988	83,0
0,51	0,9967	92,3	0,655	0,9980	86,74	0,8	0,9988	82,8
0,515	0,9968	92,15	0,66	0,9981	86,59	0,805	0,9989	82,7
0,52	0,9968	91,920	0,665	0,9981	86,435	0,81	0,9989	82,6
0,525	0,9969	91,692	0,67	0,9981	86,282	0,815	0,9989	82,5
0,53	0,9969	91,468	0,675	0,9982	86,130	0,82	0,9989	82,4
0,535	0,9970	91,246	0,68	0,9982	85,981	0,825	0,9989	82,3
0,54	0,9970	91,028	0,685	0,9982	85,833	0,83	0,9990	82,2
0,545	0,9971	90,812	0,69	0,9983	85,688	0,835	0,9990	82,1
0,55	0,9972	90,600	0,695	0,9983	85,544	0,84	0,9990	82,0
0,555	0,9972	90,390	0,7	0,9983	85,402	0,845	0,9990	81,9
0,56	0,9973	90,184	0,705	0,9983	85,262	0,85	0,9991	81,8

**Tabel A. 10 Perhitungan Kesetimbangan Uap-Cair
Etanol (1) + Eugenol (2) pada
Tekanan Atmosfer**

x₁	y₁	T (°C)	x₁	y₁	T (°C)
0,855	0,99908	81,724	0,93	0,99947	80,199
0,86	0,99911	81,621	0,935	0,99950	80,096
0,865	0,99913	81,519	0,94	0,99953	79,991
0,87	0,99916	81,417	0,945	0,99956	79,886
0,875	0,99918	81,316	0,95	0,99960	79,779
0,88	0,99920	81,214	0,955	0,99963	79,672
0,885	0,99923	81,113	0,96	0,99966	79,563
0,89	0,99925	81,013	0,965	0,99970	79,453
0,895	0,99928	80,912	0,97	0,99974	79,341
0,9	0,99931	80,811	0,975	0,99978	79,227
0,905	0,99933	80,710	0,98	0,99982	79,112
0,91	0,99936	80,608	0,985	0,99986	78,995
0,915	0,99939	80,507	0,99	0,99991	78,876
0,92	0,99941	80,405	0,995	0,99995	78,754
0,925	0,99944	80,302	1	1,00000	78,630

Tabel A.11 Perhitungan Tes Konsistensi

Tekanan 400 mmHg										
T (°C)	x1	x2	y1	y2	P _{sat}	P _{2sat}	y1 (eks)	y2 (eks)	ln(y1/y2) eks	(Δln(y1/y2)) ²
62,9*	1	0	1	0	53,32	0,117	1	0	-4,418	-4,661
66,8	0,902	0,097	0,979	0,020	63,13	0,147	0,91	76,04	-3,338	0,059
67,6	0,759	0,240	0,979	0,020	65,33	0,154	1,05	29,62	-2,342	0,000
69,7	0,622	0,377	0,979	0,020	71,41	0,174	1,17	16,85	-0,664	0,006
75,8	0,474	0,525	0,978	0,021	91,81	0,246	1,19	8,68	-1,980	0,131
86,7	0,321	0,679	0,978	0,021	139,84	0,438	1,16	3,86	-1,202	0,139
103,9	0,216	0,783	0,976	0,023	258,16	1,018	0,93	1,55	-0,510	0,000
147,7	0,157	0,842	0,975	0,024	947,65	6,176	0,34	0,25	0,322	0,003
161,1	0,128	0,871	0,973	0,027	1332,25	9,933	0,30	0,16	0,596	0,082
216,7*	0	1	0	1	4373,37	52,645	0	1	RMSD	0,229

Tekanan Atmosfer										
T (°C)	x1	x2	y1	y2	P _{sat}	P _{2sat}	y1 (eks)	y2 (eks)	ln(y1/y2) eks	(Δln(y1/y2)) ²
78,2*	1	0	1	0	100,96	0,29	1	0	-4,152	-4,192
84,5	0,902	0,098	0,980	0,020	128,66	0,40	0,85	53,16	-3,067	0,002
86,9	0,762	0,238	0,979	0,021	140,90	0,45	0,92	19,42	-2,857	0,044
96,0	0,558	0,442	0,979	0,021	196,40	0,71	0,90	6,63	-2,016	0,003
100,4	0,418	0,582	0,979	0,021	229,08	0,88	1,03	4,14	-1,409	0,011
107,4	0,321	0,679	0,978	0,022	290,20	1,22	1,06	2,63	-0,927	-1,062
141,7	0,176	0,824	0,972	0,028	807,06	5,00	0,69	0,68	0,000	0,025
167,2	0,131	0,869	0,949	0,051	1540,09	12,31	0,48	0,48	-0,021	0,726
243,0*	0	1	0	1	6833,39	99,66	0	1	RMSD	0,307

*Dititik mengeundakan persamaan Antoine

*Dititik mengeundakan persamaan Antoine

Tabel A.12 Perhitungan UNIQUAC pada Tekanan 400 mmHg dengan Parameter Antoine Literatur A

Parameter A _{ij} = 252,237 cal/mol												φ2	τ12	τ11	y1 (cal)	y2 (cal)	Komp OF
T (°C)	x1	x2	y1	y2	P _{1ext}	P _{2ext}	y1 (eks)	y2 (eks)	θ1	θ2	φ2	τ12	τ11	y1 (cal)	y2 (cal)	Komp OF	
62,9	1	0	1	0	53,32	0,117	1	0	1	0	1,54	0,69	1,017	1,4E+00	0,974		
66,8	0,902	0,097	0,979	0,020	63,13	0,147	0,91	76,04	0,840	0,16	0,78	0,21	1,54	0,69	1,016	1,1E+00	0,926
67,6	0,759	0,240	0,979	0,020	63,53	0,154	1,05	29,62	0,35	0,55	0,44	0,39	0,69	1,066	1,1E+00	0,926	
69,7	0,622	0,377	0,979	0,020	71,41	0,174	1,17	16,85	0,483	0,51	0,39	0,60	1,53	0,69	1,112	1,0E+00	0,885
75,8	0,474	0,525	0,978	0,021	91,81	0,246	1,19	8,68	0,338	0,66	0,26	0,73	1,52	0,70	1,145	1,0E+00	0,786
86,7	0,331	0,679	0,978	0,021	139,84	0,438	1,16	3,86	0,211	0,78	0,15	0,84	1,50	0,70	1,163	9,9E+01	0,552
103,9	0,216	0,783	0,976	0,023	258,16	1,018	0,93	1,55	0,135	0,86	0,09	0,90	1,48	0,71	1,172	1,0E+00	0,194
147,7	0,157	0,842	0,975	0,024	94,765	6,176	0,34	0,25	0,995	0,90	0,06	0,93	1,47	0,72	1,179	1,0E+00	14,297
161,1	0,128	0,871	0,973	0,027	1332,25	9,933	0,30	0,16	0,977	0,92	0,05	0,94	1,46	0,72	1,185	1,0E+00	33,493
232,0	0	1	0	1	4373,57	52,645	0	1	0	1	1,34	0,78	1	1	1	2,659	

Perhitungan Bubble T

Trial T (C)	P _{1ext} (cal)	P _{2ext} (cal)	y ₁	y ₂	P _{1ext}	T _{1ext}	T _{1ext}	Error ΔT	T (cal) C	AD (%)	y ₁ (cal)	y ₂ (cal)	AD (%)	AARD	6,523	AARD	1,639
62,9	53,33	0,12	1,00	0,00	53,33	62,90	0,0000	62,9	64,9	2,889	1	0,997	0	0,0003	2,058		
64,9	58,11	0,13	1,02	1,44	58,11	64,87	0,0000	64,9	67,8	0,227	0,9992	0,9992	0,0008	2,021			
67,8	65,76	0,16	1,07	1,13	63,76	67,76	0,0000	67,8	71,5	2,571	0,9986	0,9986	0,0014	1,980			
71,5	76,95	0,19	1,11	1,03	76,95	71,50	0,0000	71,5	77,5	2,139	0,9974	0,9974	0,0026	1,881			
77,5	97,97	0,27	1,15	1,00	97,97	77,45	0,0000	77,5	87,1	0,480	0,9943	0,9943	0,0057	1,624			
87,1	142,04	0,45	1,16	0,99	142,04	87,09	0,0000	87,1	97,6	6,095	0,9890	0,9890	0,0110	1,242			
97,6	207,72	0,75	1,17	1,00	207,72	97,60	0,0000	97,6	106,7	2,7784	0,9818	0,9818	0,0182	0,668			
106,7	282,74	1,15	1,18	1,00	282,74	106,66	0,0000	106,7	112,4	10,675	0,9756	0,9756	0,0244	0,270			
112,4	341,06	1,50	1,18	1,00	341,06	112,42	0,0000	112,4	112,4	0,0000	0,9999	0,9999	0,0000	1			
217,2	4413,64	53,33	0,02	1,00	4413,64	217,24	0,0000	217,24	232,0	0	1	1	1	1			

Tabel A.1.3 Perhitungan UNIQUAC pada Tekanan 400 mmHg dengan Parameter Antoine Literatur B

Parameter $A_{ij} = -342,686 \text{ cal/mol}$		Parameter $A_{ij} = 237,588 \text{ cal/mol}$															
T (°C)	x1	x2	y1	y2	P1 ^{ext}	P2 ^{ext}	y1 (eks)	y2 (eks)	θ1	θ2	φ1	φ2	r12	r21	y1 (cal)	y2 (cal)	Komp OF
66,6	1	0	1	0	59,276	0,065	0,900	1,00	0,00	1,00	0,00	1,00	13,27	0,17	1	1,0E+00	0,990
66,8	0,902	0,097	0,979	0,020	59,532	0,065	0,972	171,50	0,84	0,16	0,78	0,22	1,66	0,70	1,012	1,0E+00	0,990
67,6	0,759	0,240	0,979	0,020	61,600	0,069	1,116	66,519	0,64	0,36	0,55	0,45	1,65	0,71	1,037	8,8E-01	0,979
69,7	0,622	0,377	0,979	0,020	67,313	0,079	37,402	40,48	0,52	0,39	0,61	1,64	0,71	1,043	8,8E-01	0,980	
75,8	0,474	0,525	0,978	0,021	86,432	0,114	1,274	18,655	0,34	0,66	0,26	0,74	1,63	0,71	1,019	9,7E-01	0,944
86,7	0,321	0,679	0,978	0,021	131,290	0,215	1,238	7,868	0,21	0,79	0,16	0,84	1,60	0,72	0,973	9,6E-01	0,816
103,9	0,216	0,783	0,976	0,023	240,693	0,340	0,998	2,920	0,14	0,86	0,10	0,90	1,58	0,73	0,941	9,8E-01	0,443
147,7	0,157	0,842	0,975	0,023	861,596	0,327	0,384	0,409	0,10	0,90	0,07	0,93	1,56	0,74	0,928	9,9E-01	4,033
161,1	0,128	0,871	0,973	0,027	1200,54	0,398	0,336	0,259	0,08	0,92	0,05	0,95	1,55	0,74	0,925	9,9E-01	1,1,180
232,0	0	1	0	1	4960,07	58,882	0,906	0,00	1,00	0,00	1,00	2,10	0,60	0,004	1	OF	2,546

Perhitungan Bubble T

Trial T (C)	P1 ^{ext} (cal)	P2 ^{ext} (cal)	y1	y3	P1 ^{ext}	T _{1,ext}	Error ΔT	T (cal) C	AD (%)	y1 (cal)	y2 (cal)	AD(%)	
64,2	53,33	0,06	1,000	0,000	53,33	337,4	0,0000	64,2	0,450	0,9999	1	0,0001	2,081
66,3	58,40	0,06	1,012	1,002	58,40	339,5	0,0000	66,3	0,216	0,9997	0,0003	2,070	
69,8	67,62	0,08	1,037	0,883	67,62	343,0	0,0000	69,8	4,841	0,9993	0,0007	2,056	
74,6	82,11	0,11	1,043	0,881	82,11	347,7	0,0000	74,6	8,200	0,9985	0,0015	1,999	
82,0	110,20	0,17	1,019	0,918	110,20	355,2	0,0000	93,8	7,121	0,9961	0,0039	1,805	
95,8	169,99	0,32	0,973	0,961	169,99	366,9	0,0000	106,2	2,241	0,9913	0,0087	1,479	
106,2	259,14	0,60	0,941	0,983	259,14	379,3	0,0000	116,6	31,133	0,9843	0,0157	0,929	
116,6	360,13	1,00	0,928	0,991	360,13	389,7	0,0000	224,8	6,273	0,2141	0,7859	1,512	
224,8	4370,30	48,23	0,020	0,997	4370,30	497,9	0,0000	501,6	228,5	0	1	AARD	1,739
228,5	4658,03	53,33	0,015	1,000	4658,03	0,0000	0,0000						

Tabel A.14 Perhitungan UNIQUAC pada Tekanan Atmosfer dengan Parameter Antoine Literatur A

Parameter A _{ij} = 366.025 cal/mol									
T (°C)	x ₁	x ₂	y ₁	y ₂	P _{1^{ext}}	P _{2^{ext}}	y ₁ (eks)	y ₂ (eks)	θ
81,4	1	0	0	100,96	0,29	1	0	1	0
84,5	0,902	0,098	0,980	0,020	128,66	0,40	0,85	53,16	0,84
86,9	0,762	0,238	0,979	0,021	140,90	0,52	19,42	0,64	0,36
96,0	0,558	0,442	0,979	0,021	196,40	0,71	0,90	6,63	0,42
100,4	0,418	0,582	0,979	0,021	229,08	0,88	1,03	4,14	0,29
107,4	0,321	0,679	0,978	0,022	290,20	1,22	1,06	2,63	0,21
141,7	0,176	0,824	0,972	0,023	807,06	5,00	0,69	0,68	0,11
167,2	0,131	0,869	0,949	0,051	1540,09	12,31	0,48	0,48	0,08
243*	0	1	0	1	6833,39	99,66	0	1	0

Parameter A _{ij} = -532,295 cal/mol									
Trial T (C)	P _{1^{ext}} (cal)	P _{2^{ext}} (cal)	y ₁	y ₃	P _{1^{ext}}	P _{1^{ext}}	T _{1^{ext}}	Error ΔT	T (cal) C
81,4	100,96	0,29	1,000	0,000	100,96	78,2	0,0001	78,2	1
80,7	111,31	0,33	0,998	0,538	111,15	80,7	0,0000	80,7	0,9998
85,3	132,91	0,42	0,997	0,574	132,02	85,1	0,0000	85,1	0,9994
96,4	199,15	0,72	0,917	0,709	196,16	96,0	0,0000	96,0	0,104
108,4	399,86	1,27	0,813	0,824	294,60	107,9	0,0000	107,9	0,9978
119,7	427,89	2,08	0,736	0,895	420,53	119,1	0,0001	119,1	0,9941
144,5	871,30	5,57	0,638	0,971	858,43	144,0	0,0000	144,0	0,467
156,0	1173,57	8,42	0,618	0,985	1157,00	155,5	0,0000	155,5	2,736
243*	6878,77	100,60	0,010	1,000	6878,77	242,4	0,0001	242,4	0

OF									
ARD									
1,732									

*Dihitung menggunakan persamaan Antoine
Perhitungan Bubble T

*Dihitung menggunakan persamaan Antoine

Tabel A.15 Perhitungan UNIQUAC pada Tekanan Atmosfer dengan Parameter Antoine Literatur B

		Parameter $A_{21} = -562,899 \text{ cal/mol}$						Parameter $A_{21} = 437,693 \text{ cal/mol}$									
T (°C)	x1	x2	y1	y2	P _{1,ext}	P _{2,ext}	y'1(eks)	y'2(eks)	θ1	θ2	φ1	φ2	t ₁₂	t ₂₁	γ ₁ (cal)	γ ₂ (cal)	KompOF
81,4	1	0	0,98	0,980	0,020	108,82	0,16	0,93	0	1	0	1	2,22	0,54	1,000		
84,5	0,902	0,098	0,980	0,980	0,020	122,48	0,19	0,89	109,11	1	0,16	0,78	0,22	0,34	0,999	0,592	1,005
86,9	0,762	0,238	0,979	0,979	0,021	134,00	0,22	0,97	39,41	0,64	0,36	0,56	0,44	2,20	0,54	0,997	0,972
96,0	0,558	0,442	0,979	0,979	0,021	186,01	0,36	0,95	12,91	0,42	0,58	0,33	0,67	2,15	0,35	0,933	0,720
100,4	0,418	0,582	0,979	0,979	0,021	216,48	0,46	1,09	7,91	0,29	0,71	0,22	0,78	2,10	0,56	0,835	0,892
107,4	0,321	0,679	0,978	0,978	0,022	273,19	0,66	1,13	4,87	0,21	0,79	0,16	0,84	1,54	0,71	1,072	0,837
141,7	0,176	0,824	0,972	0,972	0,028	743,46	3,05	0,75	1,12	0,11	0,89	0,08	0,92	1,96	0,59	0,668	0,972
167,2	0,131	0,869	0,949	0,949	0,051	1393,36	8,06	0,53	0,73	0,08	0,92	0,06	0,94	1,93	0,80	0,651	0,985
243,0*	0	1	0	1	1	5955,25	78,59	0	1,28	0	1	0	1	1,73	0,55	1,000	
																OF	0,653

*Dilengkapi menggunakan persamaan Antoine Pertutungan Bubble T

Trial T (°C)	P _{1,ext} (cal)	P _{2,ext} (cal)	y ₁	y ₂	P _{1,ext}	T _{ext}	Error ΔT	T (cal) C	AD T (%)	y ₁ (cal)	y ₂ (cal)	AD y ₁ (%)	
79,8	100,96	0,15	1,000	0,000	100,96	352,9	0,0000	79,8	1	0	0		
82,2	111,04	0,17	1,007	0,591	111,04	355,4	0,0000	82,2	2,645	0,9999	0,0001	2,076	
86,7	131,30	0,22	1,008	0,595	131,30	359,8	0,0000	86,7	0,229	0,9997	0,0003	2,070	
97,4	193,04	0,39	0,932	0,719	193,04	370,6	0,0000	97,4	1,477	0,9988	0,0012	1,985	
109,4	287,64	0,72	0,835	0,829	287,64	382,5	0,0000	109,4	8,938	0,9965	0,0035	1,798	
120,7	408,75	1,23	0,761	0,898	408,75	393,9	0,0000	120,7	12,374	0,9925	0,0075	1,439	
146,3	832,22	3,68	0,668	0,972	832,22	419,5	0,0000	146,3	3,298	0,9707	0,0293	0,142	
158,4	1123,33	5,85	0,651	0,985	1123,33	431,5	0,0001	138,4	5,251	0,95019	0,04981	0,114	
253,0	6924,21	100,60	0,011	1,000	6924,21	526,2	0,0000	253,0	2,645	0	1	2,076	
									AARD	4,887			
									OF	1,374			

Tabel A.16 Perhitungan NRTL pada Tekanan 400mmHg dengan Parameter Antoine Literatur A

Parameter $b_{11} = -1001,149 \text{ cal/mol}$ Parameter $b_{21} = 1061,763 \text{ cal/mol}$ Parameter $\alpha = 0,4$

Pendituanan Bubble T										komponen											
x _i	Trial	T(K)	x _i	x _c	y _i	y _c	P _{sat} (kPa)	P _{sat} (kPa)	P _{sat} (kPa)	y _i	y _c	G ₁₁	G ₁₂	G ₂₁	G ₂₂	y _i	y _c	AARD %	AARD %		
9	0.90	65.5	128.603	0.390	-	1.184	2.030	0.623	0.996	0.388	76.045	-1.770	1.84	2.030	0.623	0.996	0.388	0.997	0.997	0.0001	2.08
	0.2	70.8	140.833	0.442	-	1.770	2.026	0.623	0.967	0.446	29.629	-1.765	1.81	2.026	0.623	0.967	0.446	0.997	0.997	0.0005	2.05
	0	69.7	340.8	0.622	0.378	0.979	0.021	0.535	0.154	1.175	16.856	-1.714	2.017	0.625	0.531	0.982	0.446	0.997	0.997	0.0013	1.99
	75.8	349.0	0.474	0.535	0.979	0.021	91.812	0.246	1.189	3.688	-1.724	1.554	0.620	0.784	0.622	0.980	0.446	0.997	0.0013	1.99	
	86.7	359.8	0.321	0.679	0.978	0.022	139.643	0.458	1.162	3.867	-1.672	1.119	0.639	0.599	0.774	0.785	0.446	0.997	0.0013	1.99	
	103.9	377.1	0.217	0.783	0.977	0.023	258.622	1.018	0.931	1.595	-1.068	0.652	0.461	0.881	0.446	0.997	0.446	0.997	0.0013	1.99	
	147.7	420.8	0.157	0.843	0.975	0.025	497.658	6.176	0.349	0.253	-1.429	0.957	1.771	0.682	0.431	0.944	0.446	0.997	0.0013	1.99	
	161.1	434.3	0.129	0.871	0.973	0.027	1332.253	9.933	0.302	0.167	-1.385	0.927	1.740	0.690	0.408	0.963	0.446	0.997	0.0013	1.99	
	0.12	146.8	0.302	0.167	-	1.365	0.927	1.740	0.690	0.408	0.963	927.518	5.998	4.200	146.8	3.28	0.9038	0.9962	0.0002	2.69	

Tabel A.17 Perhitungan NRTL pada Tekanan 400mmHg dengan Parameter Antoine Literatur B

Parameter $b_{12} = -838,822 \text{ cal/mol}$ Parameter $b_{21} = 306,324 \text{ cal/mol}$ Parameter $\alpha = 0,4$

$T(\text{K})$	x	y	P_{vap}	γ_1	γ_2	τ_{12}	τ_{21}	G_{11}	G_{21}	$\gamma_{1,(\text{cal})}$	$\gamma_{2,(\text{cal})}$	komp
$T(\text{C})$			(eks)	(eks)	(eks)							OF
64,8	339,9	0,902	0,098	0,979	0,021	59,532	0,065	0,972	171,489	-1,342	0,454	1,643
67,6	340,8	0,760	0,240	0,973	0,021	61,600	0,059	0,971	66,314	-1,225	0,447	1,652
69,7	342,9	0,622	0,173	0,973	0,021	61,313	0,079	0,979	57,595	-1,202	0,459	1,652
73,8	346,0	0,474	0,136	0,973	0,021	81,423	0,114	0,974	18,556	-1,168	0,472	1,645
80,9	349,3	0,211	0,079	0,973	0,021	111,423	0,155	0,977	0,038	0,953	0,497	1,645
101,9	377,1	0,211	0,077	0,971	0,023	246,659	0,540	0,998	1,920	1,155	0,230	1,554
145,7	420,1	0,157	0,943	0,975	0,023	841,556	3,227	0,999	1,039	1,039	0,569	1,214
161,1	434,3	0,139	0,943	0,973	0,023	1,200,540	4,399	0,998	0,259	1,008	0,368	1,486
Perhitungan Bubble T												
x	$T(\text{C})$	$P_{\text{vap}}^{\text{cal}}$	τ_{12}	τ_{21}	G_{11}	γ_1	γ_2	$P_{\text{vap}}^{\text{cal}}$	τ	T	AARD	AARD Y (%)
		(eks)	(cal)	(cal)	(cal)	(cal)	(cal)	(cal)	(K)	(C)	T (%)	Y (%)
0,902	65,5	59,532	0,965	-	0,454	1,643	0,834	0,995	1,037	59,699	0,136	0,9999
0,760	70,8	61,600	0,969	1,242	0,447	1,632	0,836	0,968	1,008	74,796	0,185	0,9995
0,622	78,1	67,313	0,079	-	0,439	1,618	0,839	0,910	0,991	100,830	0,279	0,9987
0,474	107,1	86,452	0,114	1,202	0,427	1,596	0,843	0,807	0,983	155,754	0,507	0,9961
0,221	131,290	0,215	-	0,408	1,563	0,849	0,664	0,985	0,974	287,296	1,180	0,9866
0,217	124,9	240,693	0,540	1,117	0,390	1,532	0,856	0,558	0,990	500,992	2,548	0,9644
0,157	138,7	861,596	3,827	1,067	0,376	1,309	0,860	0,501	0,994	745,492	4,425	0,9319
0,129	146,8	1,200,540	6,399	-	0,368	1,496	0,863	0,476	0,974	927,518	5,998	0,9038
			1,008							420,0	146,8	0,0962
											3,54	3,15
												AARD Y (%)
												2,90
												AARD Y (%)
												1,82

Tabel A.18 Perhitungan NRTL pada Tekanan Atmosfer dengan Parameter Antoine Literatur A

Parameter $b_{12} = -1001,149 \text{ cal/mol}$

Parameter $b_{11} = 1061,763 \text{ cal/mol}$									
$T (\text{°C})$	$T (\text{K})$	x_1	x_2	y_1	y_2	P_{sat} (eks)	P_{sat} (cal)	γ_1	γ_2
84,5	351,6	0,902	0,098	0,980	0,020	128,603	0,390	0,652	54,134
86,9	360,0	0,762	0,238	0,979	0,021	140,333	0,442	0,521	19,776
96,0	369,2	0,558	0,442	0,979	0,021	196,311	0,698	0,899	6,750
100,4	373,6	0,418	0,582	0,979	0,021	228,975	0,863	1,030	4,217
107,4	380,6	0,321	0,679	0,978	0,022	290,067	1,196	1,057	2,671
141,7	414,8	0,176	0,824	0,972	0,028	806,688	4,959	0,690	0,690
167,2	440,3	0,131	0,869	0,949	0,051	1539,335	12,164	0,475	0,484

loop
OF

Perhitungan Bubble T

x_1	$T (\text{°C})$	P_{sat} (eks)	P_{sat} (cal)	γ_1	G_{11}	G_{12}	P_{sat} (eks)	P_{sat} (cal)	γ_2	$T (\text{K})$	$T (\text{°C})$	AARD $T (\text{°C})$	γ_1	γ_2	AARD $\gamma (\%)$			
0,902	82,5	128,603	0,390	1,423	1,309	1,766	0,546	0,996	1,849	112,158	0,223	334,0	80,9	1,00	0,9998	0,0002	2,03	
0,762	85,8	140,833	0,442	1,403	1,488	1,753	0,551	0,976	1,644	135,556	0,418	338,9	85,8	1,00	0,9998	0,0002	0	
0,558	96,2	196,311	0,698	1,163	1,446	1,725	0,560	0,908	1,379	198,1	0,707	369,4	96,2	0,29	0,9993	0,0007	1,94	
0,418	107,1	228,978	0,863	1,134	-	1,405	1,698	0,570	0,833	1,225	0,873	380,3	107,1	0,07	0,9976	0,0024	1,68	
0,321	117,5	290,067	1,196	1,289	1,367	1,675	0,578	0,772	1,138	401,181	1,873	390,74	117,5	1,81	0,9942	0,0058	1,30	
0,176	141,8	806,688	4,959	1,214	1,287	1,625	0,597	0,667	1,043	811,27	4,978	415,0	141,8	2,66	0,9886	0,0114	0,74	
0,131	153,5	1539,335	12,164	1,130	1,252	1,603	0,606	0,633	1,023	1101,73	7,624	426,6	153,54	0,05	0,9594	0,0406	1,49	
															AARD $T (\text{°C})$	1,28	AARD $\gamma (\%)$	1,56

Tabel A.19 Perhitungan NRTL pada Tekanan Atmosfer dengan Parameter Antoine Literatur B

BIODATA PENULIS



Aldarina Galfanora lahir pada tanggal 8 April 1996 di Kota Surabaya. Penulis merupakan anak kedua dari 2 bersaudara. Penulis menempuh pendidikan formal di TK Mustika Rini Surabaya, melanjutkan di SDN Kalirungkut I Surabaya, kemudian melanjutkan di SMPN 9 Surabaya, dan selanjutnya di SMAN 5 Surabaya. Penulis melanjutkan pendidikan Strata 1 (S1) di Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS) Surabaya, sampai dengan terselesaikannya buku ini. Banyak pengalaman yang penulis dapatkan semasa kuliah di Jurusan Teknik Kimia ITS, diantaranya penulis pernah berorganisasi sebagai staff Komunikasi dan Informasi BEM FTI ITS. Selain itu penulis juga aktif sebagai bagian dari *Chemical Engineering Innovation Festival* (CHERNIVAL). Penulis pernah menjadi *Crew*, Subkoor, *Project Officer* dan *Technical Team* di sub acara Indonesia Chem-E-Car Indonesia (ICECC). Penulis menjalani kerja praktek di perusahaan *oil and gas* VICO Indonesia , Muara Badak, Kalimantan Timur. Di perusahaan tersebut penulis berada di unit *Engineering and Construction*. Penulis memilih Laboratorium Thermodinamika Teknik Kimia FTI-ITS untuk menyelesaikan tugas akhir. Berkat rahmat Allah SWT dan orang-orang sekitar yang selalu mendukung, penulis telah menyelesaikan Tugas Pra-Desain Pabrik Metanol dari Gas Alam dan skripsi yang berjudul “Pengukuran Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) pada Berbagai Tekanan”. Apabila ada kritik dan saran yang membangun tentang penelitian ini, maka pembaca dapat menghubungi penulis via email :aldagalfa@gmail.com

(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BIODATA PENULIS



Nisrina Huttii lahir pada tanggal 17 Agustus 1996 di Kota Surabaya. Penulis merupakan anak kedua dari 2 bersaudara. Penulis menempuh pendidikan formal di TK Mujahidin Surabaya, SD Al-Irsyad Surabaya lalu pindah ke SDN 02 Cakranegara, SMPN 02 Mataram, SMAN 01 Mataram, dan Pendidikan Strata 1 (S1) di Departemen Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS) Surabaya, sampai

dengan terselesaikannya buku ini. Banyak pengalaman yang penulis dapatkan semasa kuliah di Departemen Teknik Kimia ITS, diantaranya penulis pernah berorganisasi sebagai staff dan sekertaris *Student Talent Development (STALDEV) Department* di Himpunan Mahasiswa Teknik Kimia (HIMATEKK) FTI-ITS, crew dan subkoor di *Chemical Engineering Innovation Festival* 2016 & 2017 dan lainnya. Penulis pernah menjalani kerja praktek di PT. Pertamina *Refinery Unit IV* Cilacap bagian *Energy Conservative and Loss Control*. Penulis memilih Laboratorium Thermodinamika Teknik Kimia FTI-ITS untuk menyelesaikan tugas akhir. Berkat rahmat Allah SWT dan orang-orang sekitar yang selalu mendukung, penulis telah menyelesaikan Tugas Pradesain Pabrik Metanol dari Gas Alam dan skripsi yang berjudul “Pengukuran Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Biner Etanol (1) + Eugenol (2) pada Berbagai Tekanan”. Apabila ada kritik dan saran yang membangun tentang penelitian ini, maka pembaca dapat menghubungi penulis via email: nisrinahutti@gmail.com.

(Halaman ini sengaja dikosongkan)