DASAR-DASAR
KINETIKA REAKSI KIMIA

PENGGOLONGAN REAKSI

Beberapa macam penggolongan reaksi:

1. Berdasarkan **banyaknya fase** yang terlibat dalam sistem reaksi
   - **a) Reaksi homogen**
     - ♦ Yakni sistem reaksi dengan fase tunggal.
     - ♦ Berupa reaksi homogen fase gas atau reaksi homogen fase cair.
     - ♦ Reaksi terjadi di seluruh bagian fase
   - **b) Reaksi heterogen**
     - ♦ Yakni sistem reaksi yang mengandung lebih dari 1 (satu) fase.
     - ♦ Reaksi terjadi di permukaan antar fase
     - ♦ Contoh: sistem gas-padat, gas-cair, cair-padat, gas-cair-padat
2. Berdasarkan keberadaan atau penggunaan **katalis**
   - **a) Reaksi katalitik**
     - ♦ Yakni sistem reaksi yang menggunakan peran katalis atau katalisator.
     - ♦ Ada 2 macam, yakni reaksi katalitik homogen (jika fase katalis = fase reaksi) dan reaksi katalitik heterogen (jika fase katalis ≠ fase reaksi).
   - **b) Reaksi non-katalitik**
     Yakni sistem reaksi yang tidak menggunakan peran katalis.
3. Berdasarkan **mekanisme** atau **kompleksitas**nya
   - a) **Reaksi sederhana** (reaksi tunggal searah atau ireversibel)
   - b) **Reaksi kompleks** (reaksi bolak-balik atau reversibel, reaksi seri atau konsekutif atau berurutan, reaksi paralel, reaksi seri-paralel, reaksi rantai, reaksi polimerisasi)
4. Berdasarkan **kemolekulan reaksinya**
   Reaksi unimolekuler, reaksi bimolekuler, reaksi trimolekuler atau termolekuler
5. Berdasarkan **orde reaksinya**
   Reaksi berorde bilangan bulat, reaksi berorde bilangan pecahan
6. Berdasarkan **jenis pengoperasian reaktornya**
   - *a)* Reaksi pada sistem reaktor *batch*
   - b) Reaksi pada sistem reaktor alir atau kontinyu (reaktor alir tangki berpengaduk, reaktor alir pipa).
7. Berdasarkan prosesnya **(kondisi prosesnya)**
   - a) Reaksi isotermal (pada volume tetap, pada tekanan tetap)
   - b) Reaksi adiabatik
   - c) Reaksi non-isotermal non-adiabatik
8. Berdasarkan **arah reaksinya**
   - a) **Reaksi reversibel (bolak-balik)**
     Reaksi reversibel merupakan reaksi bolak-balik; dalam hal ini terjadi kesetimbangan.
   - b) **Reaksi ireversibel (searah)**
     Reaksi ireversibel merupakan reaksi satu arah; tidak ada keadaan setimbang, meskipun sesungguhnya tidak ada reaksi kimia yang betul-betul tidak dapat balik. Banyak kasus kesetimbangan berada sangat jauh di kanan sedemikian sehingga dianggap ireversibel.

DEFINISI KECEPATAN REAKSI

Kecepatan reaksi ekstensif: $R_i = \dfrac{mol\ i\ terbentuk}{satuan\ waktu} = \dfrac{dn_i}{dt}$ .... (1)

Kecepatan reaksi intensif:

1. Berdasarkan satuan volume fluida reaksi: $r_i = \dfrac{mol\ i\ terbentuk}{(volume\ fluida)(waktu)} = \dfrac{1}{V}\dfrac{dn_i}{dt}$ .... (2)

2. Berdasarkan satuan massa padatan (dalam sistem fluida-padat):
$$r_i' = \frac{mol\ i\ terbentuk}{(massa\ padatan)(waktu)} = \frac{1}{W}\frac{dn_i}{dt} \quad \text{.... (3)}$$

3. Berdasarkan satuan luas permukaan interfasial dalam sistem dua-fluida (atau, berdasarkan satuan luas permukaan padatan dalam sistem gas-padat):
$$r_i'' = \frac{mol\ i\ terbentuk}{(luas\ permukaan)(waktu)} = \frac{1}{S}\frac{dn_i}{dt} \quad \text{.... (4)}$$

4. Berdasarkan satuan volume padatan (dalam sistem gas-padat):
$$r_i''' = \frac{mol\ i\ terbentuk}{(volume\ padatan)(waktu)} = \frac{1}{V_s}\frac{dn_i}{dt} \quad \text{.... (5)}$$

5. Berdasarkan satuan volume reaktor:
$$r_i'''' = \frac{mol\ i\ terbentuk}{(volume\ reaktor)(waktu)} = \frac{1}{V_r}\frac{dn_i}{dt} \quad \text{.... (6)}$$

   Catatan: Dalam sistem reaksi homogen: *volume fluida dalam reaktor = volume reaktor*
   atau: $V = V_r$ .... (7)

Dengan demikian, hubungan antara kecepatan reaksi ekstensif dan intensif:

$$R_i = \begin{pmatrix} volume \\ fluida \end{pmatrix} r_i = \begin{pmatrix} massa \\ padatan \end{pmatrix} r_i' = \begin{pmatrix} luas \\ permukaan \end{pmatrix} r_i'' = \begin{pmatrix} volume \\ padatan \end{pmatrix} r_i''' = \begin{pmatrix} volume \\ reaktor \end{pmatrix} r_i''''$$

$$R_i = V\ r_i = W\ r_i' = S\ r_i'' = V_s\ r_i''' = V_r\ r_i'''' \quad \text{.... (8)}$$

Persamaan (2) lazim digunakan dalam **sistem reaksi homogen**.
Persamaan (3), (4), (5), dan (6) lazim digunakan dalam **sistem reaksi heterogen**.

STOIKIOMETRI REAKSI KIMIA

Untuk sebuah reaksi tunggal, hubungan stoikiometrik antar molekul-molekul dalam sistem reaksi dapat disajikan dalam bentuk tabel stoikiometri reaksi.

Untuk reaksi homogen tunggal: $a\ A + b\ B \longrightarrow c\ C + d\ D$ .... (9)

Jika zat A dijadikan sebagai basis perhitungan, maka persamaan (9) dapat dituliskan menjadi:

$$A + \frac{b}{a}\ B \longrightarrow \frac{c}{a}\ C + \frac{d}{a}\ D \quad \text{.... (10)}$$

Berdasarkan persamaan (10), terlihat bahwa jika 1 mol A bereaksi (atau terkonversi, atau terkonsumsi), maka hal ini berarti bahwa terdapat $\frac{b}{a}$ mol B yang bereaksi, $\frac{c}{a}$ mol C yang terbentuk, dan $\frac{d}{a}$ mol D yang terbentuk.

Dengan kata lain:

- Kecepatan terkonsumsinya B = $\frac{b}{a}$ kecepatan terkonsumsinya A; *atau:* $(-r_B) = \frac{b}{a}(-r_A)$
- Kecepatan terbentuknya C = $\frac{c}{a}$ kecepatan terkonsumsinya A; *atau:* $(r_C) = \frac{c}{a}(-r_A)$
- Kecepatan terbentuknya D = $\frac{d}{a}$ kecepatan terkonsumsinya A; *atau:* $(r_D) = \frac{d}{a}(-r_A)$

Secara umum, **hubungan stoikiometri kecepatan reaksi** (9) dapat dituliskan sebagai:

$$r = \frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} = \frac{r_C}{c} = \frac{r_D}{d} \quad \text{.... (11)}$$

atau: $r = \frac{r_i}{\nu_i}$ .... (12)

dengan r_i menyatakan kecepatan reaksi homogen pembentukan komponen i dan ν_i menyatakan koefisien stoikiometri reaksi. *(Jangan lupa bahwa ν_i berharga positif (+) untuk produk atau hasil reaksi dan negatif (-) untuk reaktan atau zat pereaksi)*

Tanda negatif (-) yang dituliskan di depan r_i biasanya digunakan untuk menyatakan **kecepatan terkonsumsinya (atau terurainya, atau berkurangnya)** komponen i. **Tanda positif** (+) digunakan untuk menyatakan **kecepatan terbentuknya** komponen i.

Sistem *Batch*

Untuk sistem *batch*, reaksi kimia yang stoikiometrinya dituliskan seperti pada persamaan (9) dapat disusun tabel stoikiometrinya (sesudah tercapai konversi A sebesar X_A) sebagai berikut:

Komponen	Mol awal	Mol terbentuk	Mol tersisa
A	n_{A0}	$-n_{A0}\,X_A$	$n_A = n_{A0} - n_{A0}\,X_A$
B	n_{B0}	$-\frac{b}{a}(n_{A0}\,X_A)$	$n_B = n_{B0} - \frac{b}{a}(n_{A0}\,X_A)$
C	n_{C0}	$\frac{c}{a}(n_{A0}\,X_A)$	$n_C = n_{C0} + \frac{c}{a}(n_{A0}\,X_A)$
D	n_{D0}	$\frac{d}{a}(n_{A0}\,X_A)$	$n_D = n_{D0} + \frac{d}{a}(n_{A0}\,X_A)$
Inert (I)	n_{I0}	0	$n_I = n_{I0}$
Jumlah	n_{T0}	$\delta\, n_{A0}\,X_A$	$n_T = n_{T0} + \delta\, n_{A0}\,X_A$

dengan: $\delta = \frac{d}{a} + \frac{c}{a} - \frac{b}{a} - 1$ ... (13)

Jumlah mol total akhir (tersisa): $n_T = n_{T0} + \delta\, n_{A0}\,X_A$ ... (14)

dengan jumlah mol total awal: $n_{T0} = n_{A0} + n_{B0} + n_{C0} + n_{D0} + n_{I0}$ ... (15)

Konsentrasi komponen yang dinyatakan dalam konversi:

$$C_A = \frac{n_A}{V} = \frac{n_{A0}(1 - X_A)}{V} \quad \text{... (16)}$$

$$C_B = \frac{n_B}{V} = \frac{n_{B0} - \frac{b}{a}(n_{A0}\,X_A)}{V} \qquad \text{atau:} \quad C_B = \frac{n_{A0}\left(\theta_B - \frac{b}{a}X_A\right)}{V} \quad \text{... (17)}$$

$$C_C = \frac{n_C}{V} = \frac{n_{C0} + \frac{c}{a}(n_{A0}\,X_A)}{V} \qquad \text{atau:} \quad C_C = \frac{n_{A0}\left(\theta_C + \frac{c}{a}X_A\right)}{V} \quad \text{... (18)}$$

$$C_D = \frac{n_D}{V} = \frac{n_{D0} + \frac{d}{a}(n_{A0}\,X_A)}{V} \qquad \text{atau:} \quad C_D = \frac{n_{A0}\left(\theta_D + \frac{d}{a}X_A\right)}{V} \quad \text{... (19)}$$

dengan: $\theta_i = \frac{n_{i0}}{n_{A0}}$ *(i menyatakan komponen-komponen sistem reaksi selain A)* ... (20)

Sistem *batch* dengan volume reaksi tetap

Kondisi sistem volume reaksi konstan (atau tetap) dapat dicapai jika:

- Selama reaksi berlangsung, V tetap atau ρ tetap
- Dalam sistem *batch* fase gas, reaktor dilengkapi dengan instrumen pengatur suhu dan tekanan, sedemikian sehingga V tetap.

- Jumlah mol produk reaksi = jumlah mol reaktan
  Contoh: Reaksi gas CO dengan air pada proses gasifikasi batubara:

  $$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$$

  2 mol 2 mol

  (jika *z-factor* dianggap tetap)
- Reaksi fase cair; ρ tetap sedemikian sehingga V tetap

Pada sistem *batch* dengan sistem volume reaksi tetap:

V sistem setiap saat (t = t) sama dengan V sistem mula-mula, atau: $V = V_0$ ... (21)

Sehingga: $C_A = \frac{n_{A0}\,(1 - X_A)}{V} = C_{A0}\,(1 - X_A)$ ... (22)

$$C_B = \frac{n_{A0}\left(\theta_B - \frac{b}{a} X_A\right)}{V} = C_{A0}\left(\theta_B - \frac{b}{a} X_A\right) \quad \text{... (23)}$$

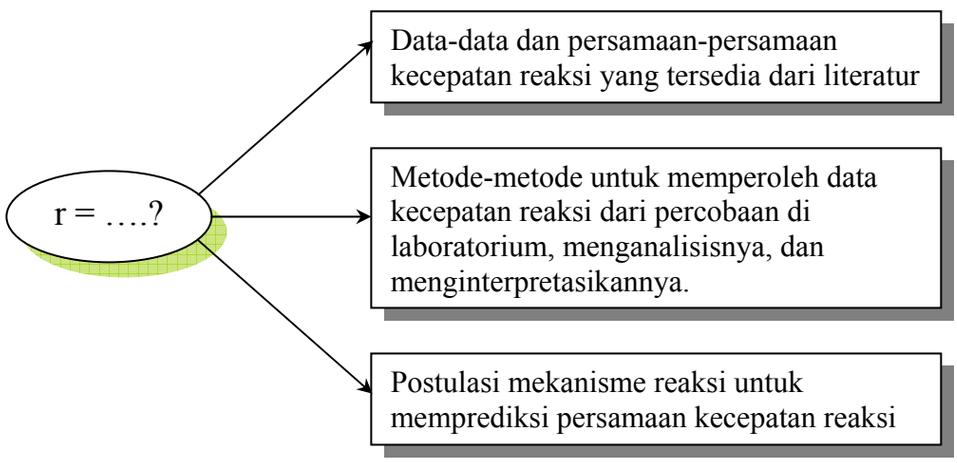
Dengan cara yang sama, maka: $C_C = C_{A0}\left(\theta_C + \frac{c}{a} X_A\right)$ ... (24)

$$C_D = C_{A0}\left(\theta_D + \frac{d}{a} X_A\right) \quad \text{... (25)}$$

Contoh Soal: *Reaksi fase cair: 3 A + B ⟶ 3 C + D, dilangsungkan dalam reaktor batch pada T dan P tetap. Campuran mula-mula mengandung A dengan konsentrasi 10 gmol/dm^3 dan B 2 gmol/dm^3. Berapakah konsentrasi hasil jika konversi A: (a) 20% dan (b) 90%*

PERSAMAAN KINETIKA ATAU KECEPATAN REAKSI

Persamaan kinetika atau kecepatan reaksi merupakan hubungan matematika yang menggambarkan besarnya perubahan jumlah mol sebuah komponen reaksi i seiring dengan perubahan waktu, sesuai dengan definisi kecepatan reaksi di bagian sebelumnya. Berikut ini merupakan penggambaran dari bagaimana persamaan kinetika atau kecepatan sebuah reaksi dapat diperoleh:



KEMOLEKULAN, ORDE, DAN KONSTANTA KECEPATAN REAKSI

Untuk model persamaan kecepatan (atau kinetika) reaksi yang berbentuk **hukum pangkat**, persamaan kecepatan reaksi homogen dapat dituliskan sebagai **fungsi konsentrasi reaktan-reaktannya**, atau:

$r = f(C_i)$ atau: $r = f(k, C_i)$ .... (26)

Persamaan ini lazim dituliskan sebagai: $r = k\, C_A^{\alpha}\, C_B^{\beta}\, C_C^{\gamma}$ .... (27)

Untuk reaksi (9), persamaan kecepatan reaksinya dapat dituliskan sebagai: $r = k\, C_A^{\alpha}\, C_B^{\beta}$ .... (28)

dengan: C_A, C_B ≡ konsentrasi reaktan A, B
α, β ≡ orde atau tingkat reaksi terhadap A, B
k ≡ konstanta atau tetapan kecepatan reaksi

Pada reaksi fase gas, dan reaksi berlangsung pada volume tetap secara isotermal, kecepatan reaksi kadang-kadang dinyatakan sebagai perubahan tekanan per satuan waktu, sehingga secara analog persamaan (26), (27), dan (28) dapat dituliskan menjadi:

$r = f(p_i)$ atau: $r = f(k, p_i)$ .... (26.a)

$r = k\, p_A^{\alpha}\, p_B^{\beta}\, p_C^{\gamma}$ .... (27.a)

$r = k\, p_A^{\alpha}\, p_B^{\beta}$ .... (28.a)

dengan p_A dan p_B masing-masing menyatakan tekanan parsial reaktan A dan B dalam sistem reaksi.

Hubungan antara Tekanan Parsial dan Tekanan Total Sistem Reaksi, Berdasarkan Stoikiometri

(Tinjau kembali subbab *Stoikiometri Reaksi Kimia* di bagian sebelumnya)

Untuk reaksi homogen fase gas yang stoikiometrinya dituliskan seperti pada persamaan (9), persamaan (14) dapat disusun ulang menjadi: $n_{A0}\, X_A = \dfrac{n_T - n_{T0}}{\delta}$ ... (29)

Jika gas-gas dalam sistem reaksi dapat dianggap berkelakuan sebagai gas ideal, maka persamaan (16) dapat disusun ulang menjadi: $C_A = \dfrac{p_A}{R\,T} = \dfrac{n_A}{V} = \dfrac{n_{A0}\,(1 - X_A)}{V} = \dfrac{n_{A0} - n_{A0}\,X_A}{V}$ ... (30)

Substitusikan (29) ke (30): $C_A = \dfrac{n_{A0}}{V} - \dfrac{n_T - n_{T0}}{\delta\, V}$ ... (31)

atau: $p_A = p_{A0} - \dfrac{1}{\delta}(P - P_0)$ ... (32)

P ≡ tekanan total sistem **setiap saat** (t = t); P_0 ≡ tekanan total sistem **mula-mula**

Dengan cara yang sama, maka p_B, p_C, dan p_D dapat dituliskan sebagai:

$$p_B = p_{B0} - \frac{b}{a}\frac{1}{\delta}(P - P_0) \quad \text{... (33)}$$

$$p_C = p_{C0} + \frac{c}{a}\frac{1}{\delta}(P - P_0) \quad \text{... (34)}$$

$$p_D = p_{D0} + \frac{d}{a}\frac{1}{\delta}(P - P_0) \quad \text{... (35)}$$

Kemolekulan *(Molecularity)* Reaksi

- Kemolekulan reaksi merupakan banyaknya molekul zat pereaksi (reaktan) dalam sebuah persamaan stoikiometri reaksi yang sederhana.
- Kemolekulan reaksi **selalu berupa bilangan bulat positif**.
  Contoh: 🖫 Reaksi: a A + b B ⟶ c C + d D
  Kemolekulan reaksinya = a + b
  🖫 Reaksi: 2 A + B ⟶ 3 C + 2 D
  Kemolekulan reaksinya = 2 + 1 = 3
- Reaksi yang mempunyai kemolekulan 1 (satu) disebut reaksi **unimolekuler**.
  Reaksi yang mempunyai kemolekulan 2 (dua) disebut reaksi **bimolekuler**.
  Reaksi yang mempunyai kemolekulan 3 (tiga) disebut reaksi **trimolekuler** atau **termolekuler**.

Orde atau Tingkat Reaksi

- Orde reaksi *(reaction order)* merupakan **jumlah pangkat faktor konsentrasi** reaktan-reaktan di dalam persamaan kecepatan (atau kinetika) reaksi.
- Orde reaksi **hanya dapat ditentukan** berdasarkan **interpretasi data hasil percobaan** di laboratorium.
- Orde reaksi dapat berupa **bilangan bulat positif**, **pecahan**, ataupun **nol**.

  Jika persamaan kecepatan reaksi (9) adalah: $r = k\, C_A^{\alpha}\, C_B^{\beta}$

  maka: α ≡ orde reaksi terhadap A
  β ≡ orde reaksi terhadap B
  $\alpha + \beta$ ≡ orde reaksi keseluruhan (atau biasa disebut **orde reaksi** saja).

- Untuk **reaksi elementer** : orde reaksi = kemolekulan reaksi .... (36)
  Untuk **reaksi non-elementer** : orde reaksi ≠ kemolekulan reaksi .... (37)

Konstanta Kecepatan Reaksi

- Konstanta kecepatan reaksi *(rate constant)* disebut juga kecepatan reaksi spesifik *(specific rate)*.
- Jika sebuah reaksi dengan reaktan tunggal A mempunyai kecepatan reaksi yang berorde n sebesar $r = k\ C_A^{\ n}$, atau: $r = k\ p_A^{\ n}$, maka reaksi tersebut mempunyai harga konstanta kecepatan reaksi sebesar: $k = \dfrac{r}{C_A^{\ n}}$ atau: $k = \dfrac{r}{p_A^{\ n}}$ .... (38 & 38.a)
- Karena dalam hal ini C_A biasa dinyatakan dalam satuan mol A per satuan volume reaksi dan r dalam satuan mol A per satuan volume reaksi per satuan waktu, maka secara umum harga k dapat dinyatakan dalam satuan: $k\ [=]\left(\dfrac{mol}{volume}\right)^{1-n}(waktu)^{-1}$ .... (39)

  atau: $k\ [=](tekanan)^{1-n}(waktu)^{-1}$ .... (39.a)

  (Coba jabarkanlah satuan-satuan konstanta kecepatan reaksi yang berorde 0, 1, 2, 3, dan ½)

  Berdasarkan satuan-satuan yang sangat spesifik untuk setiap orde reaksi yang berlainan, harga k sebuah reaksi kimia secara tidak langsung dapat mengindikasikan besarnya orde reaksi tersebut.
- Harga k sangat dipengaruhi oleh suhu. Pada reaksi fase gas, harga k juga dipengaruhi oleh katalis, tekanan total sistem, dsb. Pada reaksi fase cair, harga k juga dipengaruhi oleh tekanan total sistem, kekuatan ion, pemilihan pelarut, dsb. Namun demikian, pengaruh faktor-faktor ini biasanya sangat kecil sehingga dapat diabaikan terhadap pengaruh suhu.

FAKTOR-FAKTOR YANG MEMPENGARUHI KECEPATAN REAKSI

Beberapa faktor yang mempengaruhi kecepatan reaksi adalah:

(1) Suhu (T)
(2) Komposisi campuran reaksi (C)
(3) Tekanan (P)
(4) Keberadaan katalis atau inhibitor
(5) Parameter-parameter yang berhubungan dengan proses transfer secara fisik (misalnya: kondisi aliran, tingkat pencampuran, parameter-parameter perpindahan massa antarfase, kesetimbangan fase, luas bidang kontak antarfase, parameter-parameter perpindahan panas, dan sebagainya)

Pada reaksi homogen non-katalitik, hanya faktor (1), (2), dan (3) yang mempengaruhi kecepatan reaksi.
Pada reaksi katalitik, faktor (4) atau faktor katalis juga berperan mempengaruhi kecepatan reaksi.
Pada sistem reaksi heterogen (di mana problem yang dihadapi menjadi jauh lebih kompleks dibandingkan dengan sistem reaksi homogen), faktor (5) juga mempengaruhi kecepatan reaksi.

Pengaruh Suhu

Secara sederhana, pengaruh suhu terhadap sebagian besar reaksi kimia dapat didekati melalui korelasi yang disampaikan oleh **Arrhenius**, yakni: $k = A\ exp\left(-\dfrac{Ea}{R\,T}\right)$ .... (40)

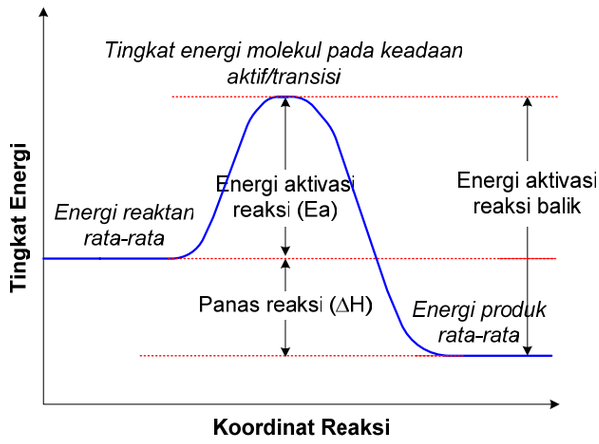
dengan:
k ≡ konstanta kecepatan reaksi
A ≡ faktor frekuensi tumbukan reaksi (atau disebut juga **faktor pre-eksponensial**)
Ea ≡ energi atau tenaga aktivasi reaksi
R ≡ konstanta gas universal (R = 8,314 J/mol.K = 1,987 kal/mol.K = 82,06 cm^3.atm/mol.K)
T ≡ **suhu absolut**
$exp\left(-\dfrac{Ea}{R\,T}\right)$ ≡ **faktor eksponensial**

Berdasarkan persamaan (40), terlihat bahwa peningkatan suhu reaksi akan meningkatkan kecepatan reaksi. Ada sebuah *rule of thumb* mengenai hal ini, yakni bahwa kecepatan reaksi kimia akan meningkat 2 (dua) kali lipat untuk setiap kenaikan suhu sebesar 10^oC. Namun demikian, *rule* ini hanya berlaku untuk sebuah kombinasi yang tertentu antara harga Ea dan T.

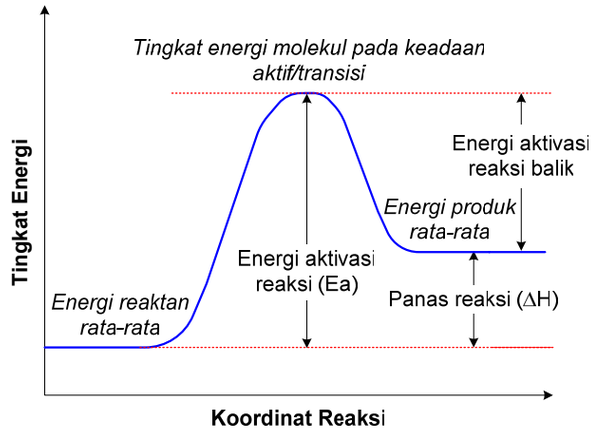
Sebagai contoh:

- Untuk reaksi dengan Ea sebesar 53,6 kJ/mol, kecepatan reaksi naik dua kali lipat antara suhu 300-310 K.
- Untuk reaksi dengan Ea sebesar 147 kJ/mol, kecepatan reaksi naik dua kali lipat antara suhu 500-510 K

Berikut ini merupakan gambaran besarnya energi aktivasi reaksi (Ea) dan panas reaksi (ΔH) (untuk kasus reaksi sederhana yang berlangsung eksotermik dan endotermik):



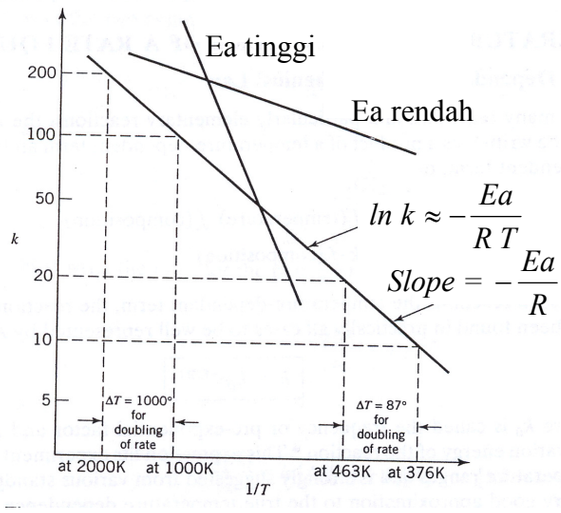
(Kasus reaksi eksotermik)



(Kasus reaksi endotermik)

Melalui percobaan di laboratorium, harga Ea sebuah reaksi dapat diketahui dengan melakukan percobaan kinetika reaksi pada berbagai suhu T yang berbeda-beda. Harga Ea dapat dievaluasi melalui penyusunan ulang persamaan Arrhenius menjadi: $ln\ k = ln\ A - \frac{Ea}{R}\frac{1}{T}$ .... (41)

atau, melalui representasi grafis sebagai berikut:



dengan **Ea merupakan harga [kemiringan kurva linier atau *slope*] x [R] dari plot linier antara ln k versus 1/T.**

Pada dasarnya, energi aktivasi sebuah reaksi merupakan ukuran sensitivitas kecepatan reaksi tersebut terhadap perubahan suhu yang terjadi. Dengan demikian, makin sensitifnya kecepatan sebuah reaksi terhadap perubahan suhu ditunjukkan oleh makin besarnya harga Ea, atau berarti pula makin curamnya plot linier ln k versus 1/T yang dihasilkan.

(lihat gambar di samping)

Pada 2 suhu yang berbeda (misal: T_1 dan T_2), hubungan antara harga k_1 (k pada T_1) dan k_2 (k pada T_2) dapat diperoleh dari persamaan Arrhenius, atau: $ln\frac{k_1}{k_2} = -\frac{Ea}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$ ... (42)

Pengaruh suhu terhadap kecepatan reaksi yang digambarkan tersebut di atas tidak berlaku untuk kasus reaksi-reaksi biokimia (enzimatik) dan reaksi peledakan.

KONVERSI, PEROLEHAN, DAN SELEKTIVITAS

♦ Konversi Sebuah Reaktan

Konversi sebuah reaktan A (X_A) dapat dinyatakan sebagai:

$$X_A = \frac{mol\ A\ yang\ terkonversi}{mol\ A\ awal} = \frac{mol\ A\ yang\ bereaksi}{mol\ A\ awal} \quad \text{.... (43)}$$

Konversi reaktan A untuk sistem reaktor yang beroperasi *batch*, sistem reaktor alir (kontinyu), dan sistem reaktor bervolume-tetap masing-masing dituliskan pada 3 persamaan berikut:

$$X_A = \frac{n_{A,0} - n_A}{n_{A,0}} \quad \text{.... (44)}$$

$$X_A = \frac{F_{A,0} - F_A}{F_{A,0}} \quad \text{.... (45)}$$

$$X_A = \frac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0}} \quad \text{.... (46)}$$

dengan: n, F, dan C masing-masing menyatakan jumlah mol, laju alir molar [mol/waktu], dan konsentrasi molar komponen [mol/volume];serta $0 \le X_A \le 1$

♦ Perolehan *(Yield)* Sebuah Produk atau Hasil Reaksi

Perolehan sebuah produk P terhadap reaktan A ($Y_{P/A}$) dapat dinyatakan sebagai:

$$Y_{P/A} = \frac{mol\ A\ yang\ bereaksi\ membentuk\ P}{mol\ A\ awal} \quad \text{.... (47)}$$

$$Y_{P/A} = \frac{mol\ A\ yang\ bereaksi\ membentuk\ P}{mol\ P\ yang\ terbentuk} x \frac{mol\ P\ yang\ terbentuk}{mol\ A\ awal} \quad \text{.... (48)}$$

$Y_{P/A}$ untuk sistem reaktor yang beroperasi *batch*, sistem reaktor alir (kontinyu), dan sistem reaktor bervolume-tetap masing-masing dituliskan pada 3 persamaan berikut:

$$Y_{P/A} = \frac{|\nu_A|_P}{\nu_P} \frac{n_P - n_{P,0}}{n_{A,0}} \quad \text{.... (49)}$$

$$Y_{P/A} = \frac{|\nu_A|_P}{\nu_P} \frac{F_P - F_{P,0}}{F_{A,0}} \quad \text{.... (50)}$$

$$Y_{P/A} = \frac{|\nu_A|_P}{\nu_P} \frac{C_P - C_{P,0}}{C_{A,0}} \quad \text{.... (51)}$$

dengan: $|\nu_A|_P$ menyatakan nilai mutlak ν_A dalam persamaan stoikiometri yang melibatkan produk P, dan $0 \le Y_{P/A} \le 1$

♦ Selektivitas *(Fractional Yield)* Sebuah Produk atau Hasil Reaksi

Selektivitas *overall* sebuah produk P terhadap reaktan A ($S_{P/A}$) dapat dinyatakan sebagai:

$$S_{P/A} = \frac{mol\ A\ yang\ bereaksi\ membentuk\ P}{mol\ A\ yang\ bereaksi} \quad \text{.... (52)}$$

$$S_{P/A} = \frac{mol\ A\ yang\ bereaksi\ membentuk\ P}{mol\ P\ yang\ terbentuk} x \frac{mol\ P\ yang\ terbentuk}{mol\ A\ yang\ bereaksi} \quad \text{.... (53)}$$

$S_{P/A}$ untuk sistem reaktor yang beroperasi *batch*, sistem reaktor alir (kontinyu), dan sistem reaktor bervolume-tetap masing-masing dituliskan pada 3 persamaan berikut:

$$S_{P/A} = \frac{|\nu_A|_P}{\nu_P} \frac{n_P - n_{P,0}}{n_{A,0} - n_A} \quad \text{.... (54)}$$

$$S_{P/A} = \frac{|\nu_A|_P}{\nu_P} \frac{F_P - F_{P,0}}{F_{A,0} - F_A} \quad \text{.... (55)}$$

$$S_{P/A} = \frac{|\nu_A|_P}{\nu_P} \frac{C_P - C_{P,0}}{C_{A,0} - C_A} \quad \text{.... (56)}$$

dengan: $0 \le S_{P/A} \le 1$

Hubungan antara perolehan, konversi, dan selektivitas: $Y_{P/A} = X_A \,.\, S_{P/A}$ .... (57)

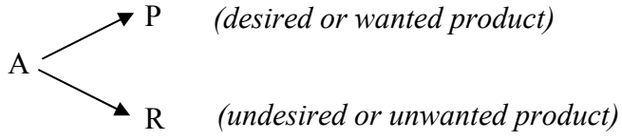
Instantaneous fractional yield sebuah produk P terhadap reaktan A ($s_{P/A}$) dapat dinyatakan sebagai:

$$s_{P/A} = \frac{kecepatan\ pembentukan\ P}{kecepatan\ berkurangnya\ A} = \frac{r_P}{-r_A} \quad \text{.... (58)}$$

Catatan:

Pada sebuah sistem **reaksi paralel**, selektivitas sebuah produk atau hasil reaksi dapat dinyatakan sebagai perbandingan antara banyaknya mol produk reaksi yang diinginkan/diharapkan *(desired or wanted product)* terhadap banyaknya mol produk reaksi yang tidak diinginkan *(undesired or unwanted product)*, **atau** perbandingan antara kecepatan pembentukan produk reaksi yang diinginkan terhadap kecepatan pembentukan produk reaksi yang tidak diinginkan.

Misal, untuk sebuah skema reaksi berikut:



maka:

$$Selektivitas = \frac{moles\ of\ desired\ product\ formed}{moles\ of\ undesired\ product\ formed} = \frac{n_P - n_{P0}}{n_R - n_{R0}} \quad \text{... (59)}$$

atau:

$$Selektivitas = \frac{r_{desired}}{r_{undesired}} = \frac{r_P}{r_R} \quad \text{... (60)}$$