


KINETIKA DAN KATALISIS
SEMESTER GASAL 2011/2012



**P
e
r
t
e
m
u
a
n
K
e
-
2
&
3**

**DASAR-DASAR KINETIKA
REAKSI KIMIA**

Siti Diyah Kholisoh

**PROGRAM STUDI TEKNIK KIMIA – FTI
UPN “VETERAN” YOGYAKARTA
Rabu, 21 September 2011**

Kompetensi yang ingin dicapai (1):

1. Mampu menyusun tabel stoikiometri reaksi (yang selalu diusahakan berbasis mol) untuk reaksi tunggal maupun reaksi kompleks, dan beberapa aplikasinya.
2. Memahami makna konversi reaksi dan molar extent of reaction, yang dikaitkan dengan limiting reactant dan excess reactant.
3. Mampu membedakan antara campuran ekuimolar, campuran stoikiometrik, dan campuran dengan perbandingan (atau rasio) molar tertentu.
4. Mampu memanfaatkan pendekatan atau asumsi keadaan ideal untuk melakukan perhitungan gas-gas.
5. Memahami beberapa macam penggolongan reaksi (dengan bisa menjelaskan perbedaannya dan contohnya masing-masing).

Kompetensi yang ingin dicapai (2):

6. Memahami beberapa cara pendefinisian kecepatan reaksi: definisi secara ekstensif dan intensif, definisi untuk reaksi homogen dan heterogen, serta mampu menjelaskan kaitannya masing-masing.
7. Memahami konsep stoikiometri dalam kecepatan reaksi dan bisa menjelaskan hubungan antara kecepatan reaksi yang dinyatakan terhadap masing-masing komponen/zatnya.
8. Memahami stoikiometri reaksi (melalui penyusunan tabel stoikiometri), untuk reaksi tunggal-vs-kompleks, maupun sistem batch-vs-kontinu (alir).
9. Memahami istilah² konversi reaksi, yield (perolehan) produk, dan selektivitas produk, serta kaitannya dengan stoikiometri reaksi.
10. Memahami gambaran reaksi yang berlangsung secara batch.

Kompetensi yang ingin dicapai (3):

11. Memahami gambaran reaksi yang berdensitas tetap (constant-density) atau berdensitas berubah (variable/varying-density).
12. Mampu memanfaatkan stoikiometri reaksi untuk menjabarkan hubungan antara konsentrasi masing² komponen reaksi dengan konversi reaktan-reaktannya.
13. Mampu memanfaatkan stoikiometri reaksi dan persamaan keadaan gas (ideal) untuk menjabarkan hubungan antara tekanan parsial masing² komponen reaksi dengan tekanan totalnya.
14. Memahami makna persamaan kinetika/kecepatan/laju reaksi kimia dan bagaimana persamaan tersebut diperoleh (untuk melakukan studi kinetika).
15. Memahami model persamaan kinetika reaksi yang berbentuk hukum pangkat (power-law) dan non-hukum pangkat.

Kompetensi yang ingin dicapai (4):

16. Memahami konsep orde atau tingkat reaksi (dalam kinetika hukum pangkat) dan perbedaannya dengan kemolekulan/molekularitas reaksi, serta memahami perbedaan antara reaksi elementer dan non-elementer (dalam konteks ini).
17. Memahami konstanta kecepatan reaksi (atau kecepatan reaksi spesifik, k) dalam persamaan kinetika reaksi dan mampu mengidentifikasi orde sebuah reaksi homogen berdasarkan satuan k.
18. Memahami faktor-faktor yang mempengaruhi kecepatan reaksi.
19. Memahami pengaruh suhu terhadap kecepatan reaksi, baik secara kualitatif maupun kuantitatif (melalui pendekatan korelasi Arrhenius).

PENGGOLONGAN REAKSI-1

1. **Berdasarkan banyaknya fase yang terlibat dalam sistem reaksi**
Reaksi homogen, reaksi heterogen
2. **Berdasarkan keberadaan atau penggunaan katalis**
Reaksi katalitik, reaksi non-katalitik
3. **Berdasarkan mekanisme atau kompleksitasnya**
Reaksi sederhana (reaksi tunggal searah atau ireversibel)
Reaksi kompleks (reaksi bolak-balik atau reversibel, reaksi seri atau konsekuatif 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

PENGGOLONGAN REAKSI-2

- 6. Berdasarkan arah reaksinya
 - Reaksi reversibel (bolak-balik)

Reaksi reversibel merupakan reaksi bolak-balik; dalam hal ini terjadi kesetimbangan.
 - Reaksi ireversibel (searah)

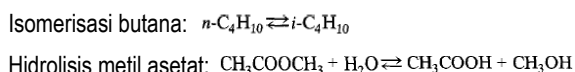
Reaksi ireversibel merupakan reaksi satu arah; tidak ada keadaan setimbang, meskipun sesungguhnya tidak ada reaksi kimia yang betul-betul tidak dapat balik. Banyak kasus kesetimbangan berada sangat jauh di kanan sedemikian sehingga dianggap ireversibel.
- 7. Berdasarkan jenis pengoperasian reaktornya
 - Sistem reaktor *batch*, sistem reaktor alir atau kontinyu
- 8. Berdasarkan prosesnya (kondisi prosesnya)
 - Reaksi isothermal (pada volume tetap, pada tekanan tetap), reaksi adiabatik, reaksi non-isothermal non-adiabatik

Contoh-contoh Reaksi

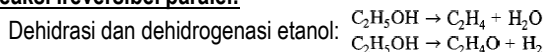
- Berorde 1:**
Dekomposisi N_2O_5 : $N_2O_5 \rightarrow 2 NO_2 + \frac{1}{2} O_2$
- Berorde 2:**
Pembentukan HI: $H_2 + I_2 \rightarrow 2 HI$
- Berorde 3:**
 $2 NO + O_2 \rightarrow 2 NO_2$
- Berorde pecahan:**
Pembentukan *phosgene* dari CO dan Cl_2 ($r = k (Cl_2)^{3/2} CO$)
- Heterogen nonkatalitik:**
 $C (s) + O_2 (g) \rightarrow CO_2 (g)$

REAKSI KOMPLEKS - Contoh

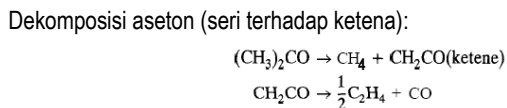
Reaksi reversibel (bolak-balik):



Reaksi ireversibel paralel:



Reaksi ireversibel seri:



DEFINISI KECEPATAN REAKSI

Kecepatan reaksi ekstensif: $R_i = \frac{\text{mol } i \text{ terbentuk}}{\text{satuan waktu}} = \frac{dn_i}{dt}$

Kecepatan reaksi intensif:

- $r_i = \frac{\text{mol } i \text{ terbentuk}}{(\text{volume fluida})(\text{waktu})} = \frac{1}{V} \frac{dn_i}{dt}$ } (sistem reaksi homogen)
- $r_i' = \frac{\text{mol } i \text{ terbentuk}}{(\text{massa pada tan})(\text{waktu})} = \frac{1}{W} \frac{dn_i}{dt}$
- $r_i'' = \frac{\text{mol } i \text{ terbentuk}}{(\text{luas permukaan})(\text{waktu})} = \frac{1}{S} \frac{dn_i}{dt}$ } (sistem reaksi heterogen)
- $r_i''' = \frac{\text{mol } i \text{ terbentuk}}{(\text{volume padatan})(\text{waktu})} = \frac{1}{V_s} \frac{dn_i}{dt}$
- $r_i'''' = \frac{\text{mol } i \text{ terbentuk}}{(\text{volume reaktor})(\text{waktu})} = \frac{1}{V_r} \frac{dn_i}{dt}$

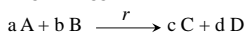
$\Rightarrow R_i = V r_i = W r_i' = S r_i'' = V_s r_i''' = V_r r_i''''$

Dalam sistem reaksi homogen: $V = V_r$

STOIKIOMETRI KECEPATAN 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:

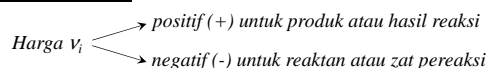


hubungan stoikiometri kecepatan reaksinya dapat dituliskan:

$r = \frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} = \frac{r_C}{c} = \frac{r_D}{d}$ atau, secara umum: $r = \frac{r_i}{V_i}$

r_i menyatakan **kecepatan reaksi homogen pembentukan** komponen i dan V_i menyatakan koefisien stoikiometri reaksi komponen i.

Jangan lupa bahwa:



Problem:

Tuliskan hubungan stoikiometrik antara laju reaksi berkurangnya reaktan dan laju reaksi terbentuknya produk, untuk reaksi-reaksi sbb.:

- a. $2 NOCl \rightarrow 2 NO + Cl_2$
- b. $H_2O_2 + H_2 \rightarrow 2 H_2O$

Hubungan antara Derajat Konversi dan Tingkat Reaksi (Molar Extent of Reaction)

$$\mathcal{E} = \frac{n_i - n_{i0}}{\nu_i} \quad (\text{tingkat reaksi})$$

$$X_i = \frac{n_{i0} - n_i}{n_{i0}} = 1 - \frac{n_i}{n_{i0}} \quad (\text{konversi reaksi})$$

(konversi reaktan i)

**STOIKIOMETRI REAKSI KIMIA
SISTEM BATCH (dalam Tingkat Reaksi)**

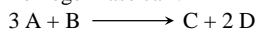
Untuk reaksi homogen tunggal: $a A + b B \longrightarrow c C + d D$
dan pada sistem *batch*, dapat disusun tabel stoikiometrinya (sesudah tercapai tingkat reaksi sebesar \mathcal{E}) sebagai berikut:

| Komponen | Mol awal | Mol terbentuk | Mol tersisa |
|-----------|----------|------------------|--------------------------------|
| A | n_{A0} | $-a \mathcal{E}$ | $n_A = n_{A0} - a \mathcal{E}$ |
| B | n_{B0} | | |
| C | n_{C0} | | |
| D | n_{D0} | | |
| Inert (I) | n_{I0} | | |
| Jumlah | n_{T0} | | |

Coba Anda isikan kolom-kolom yang lain di sini...!!!

Contoh Soal:

Reaksi homogen fase cair:



dilaksanakan dalam reaktor *batch* pada T dan P tetap, dengan volume sistem reaksi sebesar 1 dm^3 . Campuran mula-mula mengandung A dengan konsentrasi 20 gmol/dm^3 dan B sebesar 5 gmol/dm^3 .

Berapakah *molar extent of reaction* dan konsentrasi hasil jika konversi A:

- (a) 15%, dan
(b) 90%

Berikan komentar Anda...!!!

Untuk memperoleh hubungan antara tekanan parsial dan tekanan total sistem reaksi, berdasarkan stoikiometri, silakan Anda pelajari sendiri pada handout kuliah, halaman 5.

Contoh Soal:

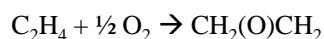
Untuk **reaksi homogen fase gas**: $A + 3 B \rightarrow$

$2 R + S$ yang berlangsung pada kondisi isothermal dalam sebuah reaktor sistem *batch* bervolume tetap, turunkanlah hubungan antara **tekanan parsial** A (p_A), B (p_B), R (p_R), dan S (p_S) sebagai fungsi tekanan totalnya (P) setiap saat. **Campuran awal reaksi** terdiri atas: A – 30%-mol, B – 50%-mol, R – 5%-mol, dan sisanya berupa **gas inert**.

Gas-gas diasumsikan berkelakuan ideal

Problem:

Set up a stoichiometric table for the following reaction and express the concentration of each species in the reaction as function of conversion evaluating all constants.



The feed enters at 6 atm and 260°C and is a stoichiometric mixture of air and ethylene. (Fogler, 1992, p. 97)

**PERSAMAAN KINETIKA ATAU
KECEPATAN REAKSI**

Persamaan kinetika atau kecepatan reaksi:

hubungan matematika yang menggambarkan besarnya perubahan jumlah mol sebuah komponen reaksi i seiring dengan perubahan waktu, sesuai dengan definisi kecepatan reaksi di bagian sebelumnya.

Bagaimana persamaan kinetika sebuah reaksi dapat diperoleh?

$r = \dots?$

Data-data dan persamaan-persamaan kecepatan reaksi yang tersedia dari literatur

Metode-metode untuk memperoleh data kecepatan reaksi dari percobaan di laboratorium, menganalisisnya, dan menginterpretasikannya.

Postulasi mekanisme reaksi untuk memprediksi persamaan kecepatan reaksi

KEMOLEKULAN, ORDE, DAN KONSTANTA KECEPATAN REAKSI-1

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

$$r = f(C_i) \quad \text{atau:} \quad r = f(k, C_i)$$

Persamaan ini lazim dituliskan sebagai: $r = k C_A^\alpha C_B^\beta C_C^\gamma \dots$

Untuk reaksi: $a A + b B \xrightarrow{r} c C + d D$

persamaan kecepatan reaksinya dapat dituliskan: $r = k C_A^\alpha C_B^\beta$

dengan: $C_A, C_B \equiv$ konsentrasi reaktan A, B

$\alpha, \beta \equiv$ orde reaksi terhadap A, B

$k \equiv$ konstanta atau tetapan kecepatan reaksi

Pada reaksi fase gas, dan reaksi berlangsung pada volume tetap secara isothermal, kecepatan reaksi kadang-kadang dinyatakan sebagai perubahan tekanan per satuan waktu.

KEMOLEKULAN, ORDE, DAN KONSTANTA KECEPATAN REAKSI-2

Kemolekulan (Molecularity) Reaksi:

banyaknya molekul zat pereaksi (reaktan) dalam sebuah persamaan stoikiometri reaksi yang sederhana.

Kemolekulan reaksi **selalu berupa bilangan bulat positif**.

Contoh: \square Reaksi: $a A + b B \longrightarrow c C + d D$

Kemolekulan reaksinya = $a + b$

\square Reaksi: $2 A + B \longrightarrow 3 C + 2 D$

Kemolekulan reaksinya = $2 + 1 = 3$

Reaksi dengan kemolekulan 1 (satu): reaksi **unimolekuler**.

Reaksi dengan kemolekulan 2 (dua): reaksi **bimolekuler**.

Reaksi dengan kemolekulan 3 (tiga): reaksi **trimolekuler** atau **termolekuler**

KEMOLEKULAN, ORDE, DAN KONSTANTA KECEPATAN REAKSI-3

Orde 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: $a A + b B \xrightarrow{r} c C + d D$

adalah: $r = k C_A^\alpha C_B^\beta$

maka: $\alpha \equiv$ orde reaksi terhadap A

$\beta \equiv$ orde reaksi terhadap B

$\alpha + \beta \equiv$ orde reaksi keseluruhan (atau disebut **orde reaksi** saja).

Untuk **reaksi elementer** : orde reaksi = kemolekulan reaksi

Untuk **reaksi non-elementer** : orde reaksi \neq kemolekulan reaksi

It is important to recognize that by no means can all reactions be said to have an order. For example, the gas phase reaction of H_2 and Br_2 to form HBr has a rate expression of the following form:

$$r = \frac{k(H_2)(Br_2)^{1/2}}{1 + \frac{k'(HBr)}{(Br_2)}} \quad (3.0.19)$$

where k and k' are constants at a given temperature and where the molecular species contained in brackets refer to the concentrations of these species. This rate expression is discussed in more detail in Section 4.2.1.

(Hill, 1977)

KEMOLEKULAN, ORDE, DAN KONSTANTA KECEPATAN REAKSI-4

Konstanta Kecepatan Reaksi (*Rate Constant*) - 1

Disebut juga **kecepatan reaksi spesifik** (*specific rate*)

Jika sebuah reaksi dengan reaktan tunggal A mempunyai kecepatan reaksi yang **berorde n** sebesar:

$$r = k C_A^n \quad \text{atau:} \quad r = k' p_A^n$$

maka reaksi tsb. mempunyai harga konstanta kecepatan reaksi sebesar:

$$k = \frac{r}{C_A^n} \quad \text{atau:} \quad k' = \frac{r}{p_A^n}$$

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:

$$k [=] \left(\frac{\text{mol}}{\text{volume}} \right)^{1-n} (\text{waktu})^{-1} \quad \text{atau:} \quad k' [=] (\text{tekanan})^{1-n} (\text{waktu})^{-1}$$

KEMOLEKULAN, ORDE, DAN KONSTANTA KECEPATAN REAKSI-5

Konstanta Kecepatan Reaksi (*Rate Constant*) - 2

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**.

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

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.

Problem:

Laju reaksi homogen: $A + B \rightarrow C + D$
 adalah: $r = k C_A^{1/2} C_B^{1/2}$

- Berapakah orde reaksi ini?
- Tuliskan salah satu contoh satuan konstanta kecepatan reaksinya.
- Jika C_A dinaikkan menjadi 4 kali lipat, menjadi berapa kali lipatkah kecepatan reaksinya?

Problem:

Sebuah reaksi homogen fase gas pada 300°C mempunyai nilai konstanta laju reaksi sebesar $5 \times 10^{-4} \text{ atm}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

- Berorde berapakah reaksi ini?
- Berapakah nilai konstanta laju reaksinya jika dinyatakan dalam kombinasi satuan: molar (*untuk konsentrasi*) dan menit (*untuk waktu*)

FAKTOR YANG MEMPENGARUHI KECEPATAN REAKSI

Beberapa faktor yang mempengaruhi kecepatan reaksi:

- Suhu (T)
- Komposisi campuran reaksi (C)
- Tekanan (P)
- Keberadaan katalis atau inhibitor
- Parameter-parameter yang berhubungan dengan proses transfer secara fisik (misalnya: kondisi aliran, tingkat pencampuran, parameter-parameter perpindahan massa antarfasa, kesetimbangan fase, luas bidang kontak antarfasa, parameter-parameter perpindahan panas, dsb).

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 TERHADAP KONSTANTA KECEPATAN REAKSI

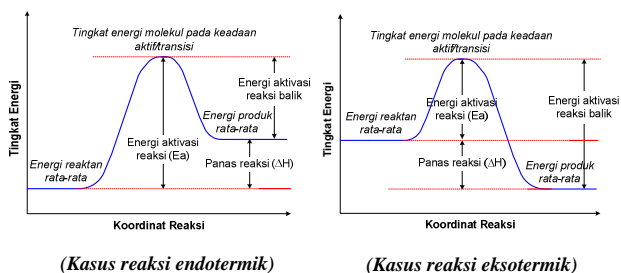
Secara sederhana, pengaruh suhu terhadap sebagian besar reaksi kimia dapat didekati melalui korelasi yang disampaikan oleh **Arrhenius**, yakni:

$$k = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad \Rightarrow \quad \text{Jika } T \text{ makin besar, maka } k \text{ juga makin besar}$$

dengan:

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

Gambaran Energi Aktivasi (E_a) dan Panas Reaksi (ΔH) untuk Kasus Reaksi Sederhana



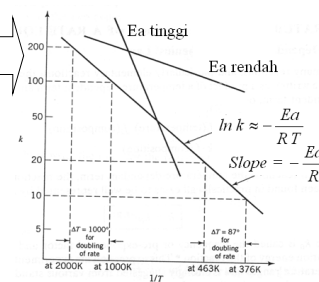
Penentuan Energi Aktivasi Reaksi berdasarkan Percobaan

E_a sebuah reaksi dapat diketahui melalui percobaan kinetika reaksi pada berbagai suhu T yang berbeda-beda.

| | | | | | | |
|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-----|
| T | T_1 | T_2 | T_3 | T_4 | T_5 | ... |
| k | k_1 | k_2 | k_3 | k_4 | k_5 | ... |

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{R} \frac{1}{T}$$

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



Problem:

Sebuah reaksi homogen mempunyai energi pengaktifan sebesar 65 kJ mol^{-1} . Pada suhu 100°C reaksi ini mempunyai kecepatan sebesar $7,8 \times 10^{-2} \text{ mol liter}^{-1} \text{ detik}^{-1}$.

- Pada suhu berapa kecepatannya menjadi 1/10 kali kecepatan pada 100°C ?
- Berapakah kecepatan reaksi pada 20°C , jika data yang lain tetap?

Problem:

Harga k yang teramati untuk reaksi fase gas: $2 \text{ HI} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{I}_2$ pada 356°C dan 443°C masing-masing adalah $3,02 \times 10^{-5}$ dan $2,53 \times 10^{-3} \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3 \text{ s}^{-1}$. Jika perubahan entalpi reaksinya (*dianggap tetap pada rentang suhu yang ditinjau*) adalah $\Delta H = 16,32 \text{ kJ/mol}$, berapakah besarnya energi aktivasi reaksi ini dalam arah maju (*forward*) maupun kebalikannya (*reverse*)?

Problem:

Ada dua reaksi homogen berorde dua dengan konstanta laju k_1 dan k_2 serta $E_{a1} > E_{a2}$. Jika suhu reaksi dinaikkan dari T_1 ke T_2 , maka:

$$\frac{k_1(T_2)}{k_1(T_1)} \dots\dots\dots ? \dots\dots\dots \frac{k_2(T_2)}{k_2(T_1)}$$

Konversi Sebuah Reaktan

Konversi sebuah reaktan A (X_A):

$$X_A = \frac{\text{mol A yang terkonversi}}{\text{mol A awal}} = \frac{\text{mol A yang bereaksi}}{\text{mol A awal}}$$

$$X_A = \frac{n_{A,0} - n_A}{n_{A,0}}$$

$$X_A = \frac{F_{A,0} - F_A}{F_{A,0}}$$

$$X_A = \frac{C_{A,0} - C_A}{C_{A,0}}$$

$$0 \leq X_A \leq 1$$

Perolehan (Yield) Sebuah Produk Reaksi

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

$$Y_{P/A} = \frac{\text{mol A yang bereaksi membentuk P}}{\text{mol A awal}}$$

$$Y_{P/A} = \frac{|v_A|_P}{v_P} \frac{n_P - n_{P,0}}{n_{A,0}}$$

$$Y_{P/A} = \frac{|v_A|_P}{v_P} \frac{F_P - F_{P,0}}{F_{A,0}}$$

$$Y_{P/A} = \frac{|v_A|_P}{v_P} \frac{C_P - C_{P,0}}{C_{A,0}} \quad 0 \leq Y_{P/A} \leq 1$$

Selektivitas (Fractional Yield) Produk Reaksi

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

$$S_{P/A} = \frac{\text{mol A yang bereaksi membentuk P}}{\text{mol A yang bereaksi}}$$

$$S_{P/A} = \frac{|v_A|_P}{v_P} \frac{n_P - n_{P,0}}{n_{A,0} - n_A}$$

$$S_{P/A} = \frac{|v_A|_P}{v_P} \frac{F_P - F_{P,0}}{F_{A,0} - F_A}$$

$$S_{P/A} = \frac{|v_A|_P}{v_P} \frac{C_P - C_{P,0}}{C_{A,0} - C_A} \quad 0 \leq S_{P/A} \leq 1$$

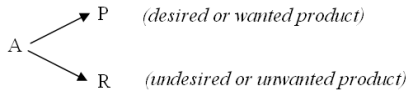
Hubungan antara perolehan, konversi, dan selektivitas:

$$Y_{P/A} = X_A \cdot S_{P/A}$$

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

$$s_{P/A} = \frac{\text{kecepatan pembentukan P}}{\text{kecepatan berkurangnya A}} = \frac{r_P}{-r_A}$$

Pada sebuah sistem **reaksi paralel**:



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

$$\text{Selektivitas} = \frac{r_{\text{desired}}}{r_{\text{undesired}}} = \frac{r_P}{r_R}$$

Hubungan antara Derajat Konversi dan Tingkat Reaksi (Molar Extent of Reaction)

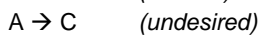
$$\varepsilon = \frac{n_i - n_{i0}}{v_i} \quad (\text{tingkat reaksi})$$

$$X_i = \frac{n_{i0} - n_i}{n_{i0}} = 1 - \frac{n_i}{n_{i0}} \quad (\text{konversi reaksi})$$

$$n_i - n_{i0} = \sum_{k=1}^{k=R} v_{ki} \varepsilon_k \quad (\text{untuk multiple reactions})$$

Test Yourself!

Consider the following pair of reactions:

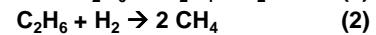
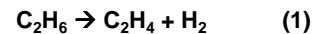


Suppose 100 mol of A is fed to a batch reactor and the final product contains 20 mol of A, 140 mol of B, and 10 mol of C. Calculate:

- The fractional conversion of A
- The percentage selectivity of B & C relative to A
- The extents of the first and second reactions

Yield & Selectivity in a Dehydrogenation Reactor

Reaksi fase-gas:



Kondisi awal: 85%-mol etana and sisanya inert (I).

Fractional conversion etana = 0,70

Fractional yield (selektivitas) etilena = 0,60.

Calculate the molar composition of the product gas.

CONTOH SOAL



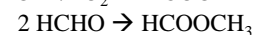
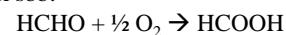
berlangsung dalam sebuah reaktor bervolume tetap yang beroperasi secara *batch*. Jika:

- # mula-mula hanya terdapat A dan Q dengan konsentrasi masing-masing sebesar: $C_{A0} = 0,5$ mol/L dan $C_{Q0} = 0,01$ mol/L,
- # selektivitas (*overall fractional yield*) terhadap pembentukan P sebesar 80%,
- # dan banyaknya A yang telah bereaksi pada suatu saat sebesar 35%, maka berapa:

- konentrasi A, P, Q, dan R pada saat tersebut?
- yield (atau perolehan) produk P pada saat tersebut?

Problem (Fogler, 1992, p. 531)

Oksidasi formaldehida yang menghasilkan asam formiat berlangsung dalam fase gas menurut reaksi sbb:



yang berlangsung simultan. Jika $k_1 = 0,7$ (dm^3/mol)^{1/2} min⁻¹ dan $k_2 = 0,6$ (dm^3/mol) min⁻¹. Laju alir volumetrik umpan masuk = 100 dm³/min pada 5 atm dan 140°C. Umpan berupa campuran: HCHO 66,7% dan O₂ 33,3%. Waktu ruang = 10 menit.

- Berapa konversi HCHO?
- Berapa yield dan selektivitas HCOOH?