

Neraca massa dengan reaksi kimia

- Stoikiometri –
Felder-Rousseau Chap. 4

Stoikiometri

- berasal dari kata *stoichion* yang berarti unsur.
- perhitungan kuantita suatu zat dengan mendasarkan kepada unsur / zat lain yang sudah diketahui.
- Persamaan reaksi kimia



mempunyai dua arti :

1. Bersifat kualitatif yaitu menunjukkan apa yang bereaksi dan apa yang dihasilkan

Bahan A dan B merupakan reaktan atau pereaksi.

Bahan C dan D merupakan produk atau hasil reaksi.

2. Kuantitatif, yaitu perbandingan mol-mol sebelum dan sesudah reaksi.

Jika 1 mol A bereaksi maka (b/a) mol B yang bereaksi.

Di dalam praktek, jarang terdapat peristiwa dimana reaksi berjalan secara tepat stoikiometris.

Biasanya, salah satu reaktan berada dalam jumlah yang berlebihan, sehingga reaksi tidak bisa berjalan stoikiometris.

Pada akhir reaksi masih ada sisa-sisa reaktan.

TERMS/ISTILAH-ISTILAH

1. **LIMITING REACTANS** (reaktan pembatas) :

yaitu pereaksi yang jumlahnya paling sedikit jika ditinjau dari perbandingan stoikiometri.

Contoh :



jika pada kenyataannya $A : B = 1 : 3$ maka A adalah limiting reactant, yang pada reaksi akan habis terlebih dulu

TERMS/ISTILAH-ISTILAH

2. EXCESS REACTANT (reaktan yang berlebihan)

yaitu zat pereaksi yang berada dalam keadaan berlebihan bila didasarkan atas jumlah ekivalen terhadap zat pereaksi pembatas

Untuk contoh di atas adalah B.

3. EXCESS AMOUNT OF REACTANT/TRUE EXCESS/EXCESS

yaitu jumlah kelebihan dari zat pereaksi yang berlebihan, bila dibandingkan terhadap jumlah ekivalen stoikiometri zat pereaksi pembatas.

TERMS/ISTILAH-ISTILAH

4. THEORETICALLY REQUIRED AMOUNT OF A REACTANT

(jumlah teoritis zat pereaksi yang diperlukan)

jumlah zat pereaksi yang ekuivalen stoikiometri terhadap zat pereaksi pembatas.

5. PERCENTAGE EXCESS OF A REACTANT (persen kelebihan zat pereaksi)

kelebihan dari suatu zat pereaksi yang dinyatakan dalam persen terhadap jumlah teoritis yang diperlukan dari pereaksi itu.

$$\% \text{ excess} = \frac{\text{jumlah mol kelebihan dari kebutuhan teoritis}}{\text{jumlah mol kebutuhan teoritis}} \times 100\%$$

- Jumlah mol kelebihannya = (mol umpan) – (mol kebutuhan teoritisnya).
- Teoritis merupakan kondisi jika limiting reactant habis bereaksi.

TERMS/ISTILAH-ISTILAH

6. DEGREE OF COMPLETION OF A REACTANT

(derajat kesempurnaan reaksi)

persen dari zat pereaksi pembatas yang bereaksi terhadap jumlah zat pereaksi pembatas yang semula ada

7. PERCENTAGE CONVERSION OF ANY REACTANT

(persen konversi suatu zat pereaksi) persen zat pereaksi yang benar-benar bereaksi terhadap jumlah zat bereaksi yang semula ada

TERMS/ISTILAH-ISTILAH

8. **KONVERSI** =
$$\frac{\text{jumlah mol reaktan yang bereaksi}}{\text{jumlah mol reaktan yang masuk reaktor}} \cdot 100\%$$

9. **YIELD** =
$$\frac{\text{mol produk yang diinginkan}}{\text{mol produk terbentuk tanpa reaksi samping dan apabila reaktan pembatas bereaksi sempurna}}$$

10. **SELECTIVITY** =
$$\frac{\text{mol produk yang diinginkan}}{\text{mol produk yang tidak diinginkan (produk samping)}}$$

Soal

1. Akrilonitril diproduksi dengan mereaksikan propilen, amonia dan oksigen, seperti reaksi:



Umpan reaktor berisi 10% propilen, 12% amonia, dan 78% udara.

Tentukan:

- limiting reactant.
- % excess reactant.
- Jika konversi limiting reactant hanya 30%, berapa rasio (mol akrilonitril/mol NH₃ umpan).
- Komposisi di arus keluar reaktor.

Penyelesaian

- Tentukan basis 100 mol campuran umpan reaktor

10 mol C₃H₆

12 mol NH₃

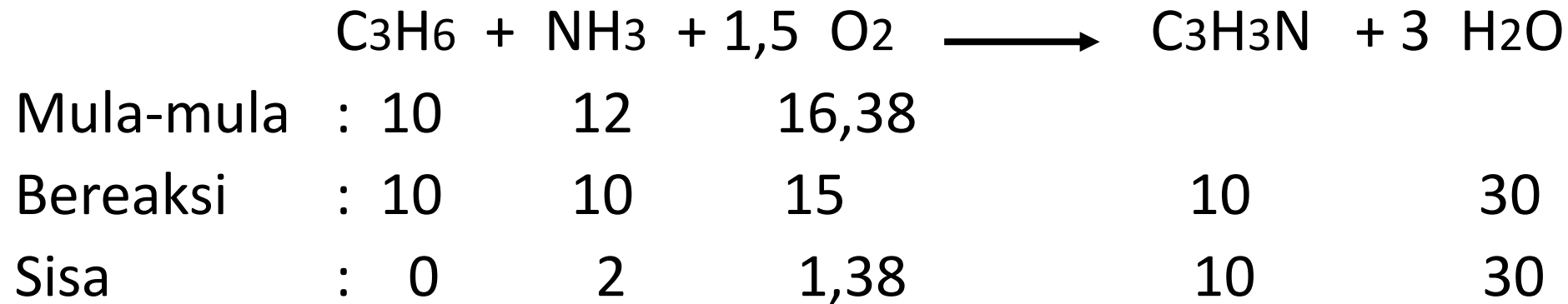
78 mol udara :



$0,21 \times 78 \text{ mol O}_2 = 16,38 \text{ mol}$

$0,79 \times 78 \text{ mol N}_2 = 61,62 \text{ mol}$

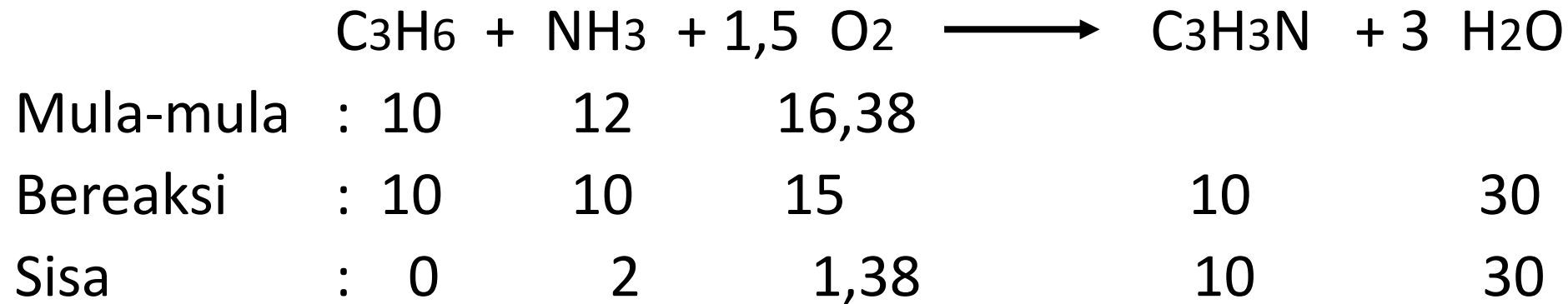
a. *Limiting reactant* :



Propilen habis bereaksi, sedangkan amonia dan udara mencukupi untuk bereaksi dengan propilen secara stoikiometris.

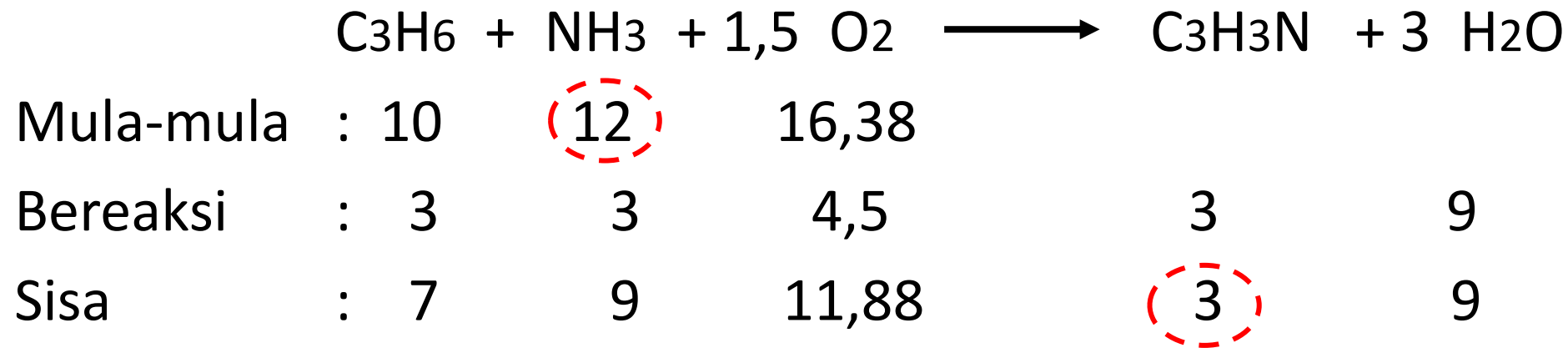
Sehingga *limiting reactant* = **propilen**

b. % excess reactant :



$$\begin{aligned} \% \text{ excess reactant NH}_3 &= (\text{mol NH}_3 \text{ umpan} - \text{mol NH}_3 \text{ teoritis}) \times 100\% / \text{mol} \\ \text{NH}_3 \text{ teoritis} &= \frac{(12-10)}{10} \times 100\% = 20\% \end{aligned}$$

c. Rasio mol akrilonitril/mol NH₃ umpan :



Propilen bereaksi 30% x 10 = 3 mol.

Rasio mol akrilonitril/mol NH₃ umpan = 3 / 12 = 0,25

d. Komposisi di arus keluar reaktor :



Mula-mula : 10 12 16,38

Bereaksi : 3 3 4,5 3 9

Sisa : 7 9 11,88 3 9

Komposisi : $\text{C}_3\text{H}_6 = 7 \text{ mol} = (7/101,5) \times 100\% = 6,9 \%$

$\text{NH}_3 = 9 \text{ mol} = 8,87\%$

$\text{O}_2 = 11,88 \text{ mol} = 11,7\%$

$\text{C}_3\text{H}_3\text{N} = 3 \text{ mol} = 2,96\%$

$\text{H}_2\text{O} = 9 \text{ mol} = 8,87\%$

$\text{N}_2 = 61,62 \text{ mol} = 60,7\%$

Total = 101,50 mol

2. Suatu reaktor digunakan untuk mengoksidasi SO_2 menjadi SO_3 .
Udara umpan berlebihan 20% dan konversi SO_2 hanya 90%.
Tentukan komposisi gas hasil reaktor.
3. Suatu konverter digunakan untuk mengoksidasi SO_2 menjadi SO_3 .
Umpan reaktor terdiri atas 12% SO_2 , 8% O_2 dan 80% N_2 . Jika konversi SO_2 hanya 95% dan diinginkan SO_3 yang dihasilkan 100 mol/jam, tentukan :
- kecepatan gas umpan.
 - komposisi gas hasil konverter.

4. Sebuah reaktor kontinyu menjalankan reaksi sbb :

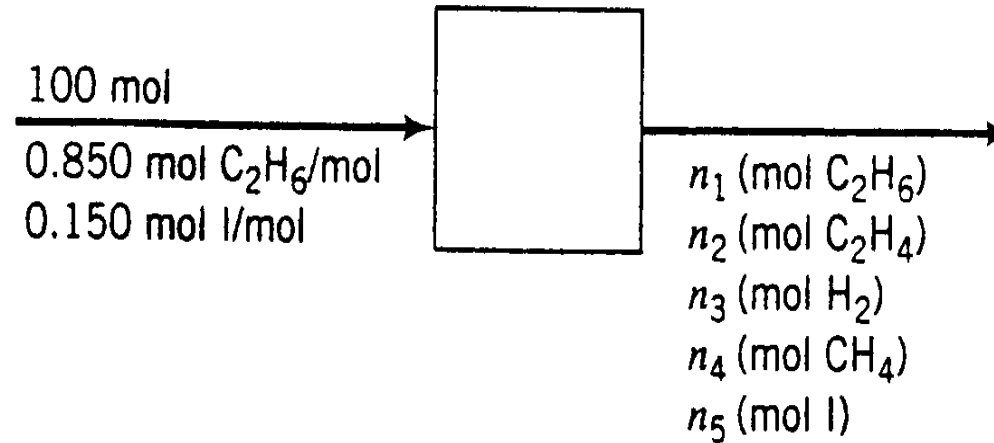


Umpan reaktor terdiri atas 85% C₂H₆ dan sisanya inert.

Konversi C₂H₆ dalam reaktor 50%. Yield (perolehan) C₂H₄ sebesar 0,47.

Hitunglah : komposisi keluaran reaktor dan selektivitas C₂H₄ terhadap CH₄.

Basis: 100 mol Feed



From Equation 4.6-6, the outlet component amounts in terms of extents of reaction are as follows:

$$n_1(\text{mol C}_2\text{H}_6) = 85.0 \text{ mol C}_2\text{H}_6 - \xi_1 - \xi_2$$

$$n_2(\text{mol C}_2\text{H}_4) = \xi_1$$

$$n_3(\text{mol H}_2) = \xi_1 - \xi_2$$

$$n_4(\text{mol CH}_4) = 2\xi_2$$

$$n_5(\text{mol I}) = 15.0 \text{ mol I}$$

Ethane Conversion

If the fractional conversion of ethane is 0.501, the fraction *unconverted* (and hence leaving the reactor) must be $(1 - 0.501)$.

$$n_1 = \frac{(1 - 0.501) \text{ mol C}_2\text{H}_6 \text{ unreacted}}{\text{mol C}_2\text{H}_6 \text{ fed}} \quad \Bigg| \quad \frac{85.0 \text{ mol C}_2\text{H}_6 \text{ fed}}{\text{mol C}_2\text{H}_6 \text{ fed}}$$

$$= 42.4 \text{ mol C}_2\text{H}_6 = 85.0 \text{ mol C}_2\text{H}_6 - \xi_1 - \xi_2 \quad (1)$$

Ethylene Yield

$$\text{maximum possible ethylene formed} = \frac{85.0 \text{ mol C}_2\text{H}_6 \text{ fed} \quad | \quad 1 \text{ mol C}_2\text{H}_4}{1 \text{ mol C}_2\text{H}_6} = 85.0 \text{ mol}$$



$$n_2 = 0.471(85.0 \text{ mol C}_2\text{H}_6) = 40.0 \text{ mol C}_2\text{H}_4 = \xi_1$$

Substituting 40.0 mol for ξ_1 in Equation 1 yields $\xi_2 = 2.6$ mol. Then

$$n_3 = \xi_1 - \xi_2 = 37.4 \text{ mol H}_2$$

$$n_4 = 2\xi_2 = 5.2 \text{ mol CH}_4$$

$$n_5 = 15.0 \text{ mol I}$$

$$n_{\text{tot}} = (42.4 + 40.0 + 37.4 + 5.2 + 15.0) \text{ mol} = 140.0 \text{ mol}$$



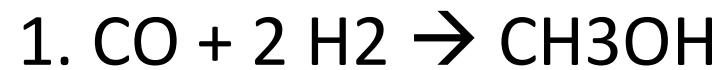
Product:

30.3% C₂H₆, 28.6% C₂H₄, 26.7% H₂, 3.7% CH₄, 10.7% I

$$\text{selectivity} = (40.0 \text{ mol C}_2\text{H}_4) / (5.2 \text{ mol CH}_4)$$

$$= 7.7 \frac{\text{mol C}_2\text{H}_4}{\text{mol CH}_4}$$

5. Sintesis metanol dilakukan dengan umpan yang terdiri atas CO 20%, CO₂ 8%, H₂ 68% dan inert 4%. Reaksi yang terjadi :



Konversi CO 30% dan konversi H₂ 35%. Bagaimana komposisi keluar reaktor?