



**PRA-RANCANGAN PABRIK *PARAXYLENE*:
SPESIFIKASI DESAIN REAKTOR TIPE *PACKED BED*
MENGUNAKAN KATALIS ZSM-5 BERBASIS
PERHITUNGAN *PROCESS SIMULATOR SOFTWARE***

Skripsi

**diajukan sebagai salah satu persyaratan untuk memperoleh gelar
Sarjana Teknik Program Studi Teknik Kimia**

Oleh

Desi Puryani

NIM. 5213415021

**JURUSAN TEKNIK KIMIA
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS NEGERI SEMARANG
2019**

HALAMAN PENGESAHAN PEMBIMBING

Nama : Desi Puryani
NIM : 5213415021
Jurusan : Teknik Kimia
Judul : Pra-Rancang Pabrik *Paraxylene*: Spesifikasi Desain Reaktor Tipe *Packed Bed* Menggunakan Katalisi ZSM-5 Berbasis Perhitungan *Process Simulator Software*

Skripsi ini telah disetujui untuk diajukan ke sidang panitia ujian skripsi jurusan Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas negeri Semarang.

Semarang, 5 Agustus 2019

Pembimbing,



Bayu Triwibowo, S.T., M.T.

NIP. 198811222014041001

PENGESAHAN PENGUJI

Skripsi dengan judul "Pra-Rancang Pabrik *Paraxylene*: Spesifikasi Desain Reaktor Tipe *Packed Bed* Menggunakan Katalisi ZSM-5 Berbasis Perhitungan *Process Simulator Software*" telah dipertahankan di depan sidang Panitia Ujian Skripsi Fakultas Teknik Universitas Negeri Semarang pada tanggal 12 Agustus 2019.

Oleh

Nama : Desi Puryani
NIM : 5213415021
Jurusan : Teknik Kimia

Panitia

Ketua

Sekretaris



Dr. Wara Dyah Pita Rengga, S.T., M.T.
NIP. 197405191999032001



Dr. Megawati, S.T., M.T.
NIP. 197211062006042001

Penguji 2

Penguji 1

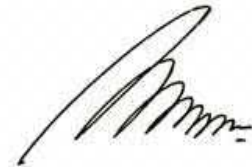
Pembimbing



Dr. Widi Astuti, S.T., M.T.
NIP. 197310172000032001



Dr. Astrilia Damayanti, S.T., M.T.
NIP. 197309082006042001



Bayu Triwibowo, S.T., M.T.
NIP. 198811222014041001

Mengetahui,

Dekan Fakultas Teknik



Dr. Nur Qudus, M.T., IPM.
NIP. 196911301994031001

PERNYATAAN KEASLIAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa :

1. Skripsi ini, adalah asli dan belum pernah diajukan untuk mendapatkan gelar akademik (sarjana, magister, dan/atau doktor), baik di Universitas Negeri Semarang (UNNES) maupun di perguruan tinggi lain.
2. Karya tulis ini adalah murni gagasan, rumusan dan penelitian saya sendiri, tanpa bantuan pihak lain, kecuali arahan Pembimbing dan masukan Tim Penguji.
3. Dalam karya tulis ini tidak terdapat karya atau pendapat yang telah ditulis atau dipublikasikan orang lain, kecuali secara tertulis dengan jelas dicantumkan sebagai acuan dalam naskah dengan disebutkan nama pengarang dan dicantumkan dalam daftar pustaka.
4. Pernyataan ini saya buat dengan sesungguhnya dan apabila di kemudian hari terdapat penyimpangan dan ketidakbenaran dalam pernyataan ini, maka saya bersedia menerima sanksi akademik berupa pencabutan gelar yang telah diperoleh karena karya ini, serta sanksi lainnya sesuai dengan norma yang berlaku di perguruan tinggi ini

Semarang, 5 Agustus 2019

Yang membuat pernyataan,



Desi Puryani

NIM. 5213415021

MOTTO

*“Maka sesungguhnya bersama kesulitan itu ada kemudahan, sesungguhnya
bersama kesulitan itu ada kemudahan”*

(QS. Al-Insyirah: 5-6)

PERSEMBAHAN

1. Allah SWT
2. Nabi Muhammad SAW
3. Bapak, Ibu, dan seluruh keluarga tercinta.
4. Seluruh Dosen Teknik Kimia Universitas Negeri Semarang.
5. Segenap kawan seperjuangan Teknik Kimia Universitas Negeri Semarang Angkatan 2015.
6. Almameter Universitas Negeri Semarang.

ABSTRAK

PRA-RANCANGAN PABRIK *PARAXYLENE*: SPESIFIKASI DESAIN REAKTOR TIPE *PACKED BED* MENGGUNAKAN KATALIS ZSM-5 BERBASIS PERHITUNGAN *PROCESS SIMULATOR SOFTWARE*

Desi Puryani

Universitas Negeri Semarang, Semarang, Indonesia

Dosen Pembimbing: Bayu Triwibowo, S. T., M.T.

Paraxylene (dimetil-benzena) merupakan suatu cairan yang tak berwarna, mudah terbakar, beracun dan digolongkan ke dalam hidrokarbon aromatik. *Paraxylene* dapat diolah menjadi berbagai macam produk akhir seperti pembuatan *purified terephthalic acid* (PTA) dan *dimethyl terephthalate* (DMT). *Purified terephthalic acid* (PTA) dan *dimethyl terephthalate* (DMT) dapat diolah sebagai bahan industri plastik maupun tekstil yang dapat disebut perantara polyester, serta dapat digunakan sebagai bahan film, resin fiber, *plasticizer*, bahan campur bensin, zat pengemulsi untuk fungisida dan insektisida, bahan penggosok. Reaksi pembuatan *paraxylene* ini dilakukan dalam *packed bed reactor* dengan kondisi operasi suhu sebesar 400°C dan tekanan operasi 3 bar. Perbandingan toluena masuk dan metanol adalah 2:1 sehingga toluena sisa yang tidak ikut bereaksi akan keluar bersama produk. Oleh karena itu, perlu dilakukan simulasi untuk mengetahui kondisi operasi optimum dalam pembentukan *paraxylene*. Simulasi dilakukan menggunakan *process simulation software*.

Reaktor tipe *packed bed* yaitu untuk mereaksikan umpan dengan fase gas dan katalis dalam bentuk padat. Katalis yang digunakan yaitu ZSM-5, dengan perbandingan umpan toluena dan katalis adalah 1 : 2,5.

Hasil perancangan reaktor tipe *packed bed* adalah diameter kolom sebesar 2,6494 meter, panjang reaktor 11,5865 m, dan jumlah *tube* 1102, volume reaktor 61,1422 m³, serta waktu tinggal 1,4646 sekon.

Kata kunci: *Paraxylene, packed bed reactor, process simulation software*

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT atas rahmat dan hidayah-Nya sehingga penulis mampu menyelesaikan skripsi ini dengan Judul “Pra-Rancangan Pabrik *Paraxylene*: Spesifikasi Desain Reaktor Tipe *Packed Bed* Menggunakan Katalis Zsm-5 Berbasis Perhitungan *Process Simulator Software*”. Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk menyelesaikan pendidikan Program Strata I Jurusan Teknik Kimia pada Universitas Negeri Semarang.

Penyusunan Skripsi ini tidak lepas dari dukungan orang-orang disekitar kami, sehingga kami ingin mengucapkan terima kasih kepada:

1. Dr. Nur Qudus, M.T., selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Negeri Semarang.
2. Dr. Wara Dyah Pita Rengga, S.T., M.T. selaku Ketua Jurusan Teknik Kimia Universitas Negeri Semarang.
3. Bayu Triwibowo, S.T., M.T. selaku dosen pembimbing atas arahan dan motivasi yang membangun dalam penyusunan Tugas Penelitian.
4. Dr. Widi Astuti, S.T., M.T. dan Dr. Astrilia Damayanti, S.T., M.T. selaku dosen penguji yang telah memberikan arahan dan koreksi dalam penyempurnaan penyusunan Tugas Penelitian.
5. Orangtua dan saudara/saudari, beserta keluarga lainnya yang telah memberi dukungan baik moril dan materil, serta doa yang tulus.
6. Segenap teman seperjuangan Teknik Kimia UNNES angkatan 2015.
7. Semua pihak yang telah membantu dalam pelaksanaan dan penyusunan Tugas Penelitian ini.

Penulis menyadari bahwa dalam penulisan Skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, maka dari itu penulis mengharapkan saran untuk menyempurnakannya. Penulis berharap Skripsi ini dapat bermanfaat bagi penulis dan pembaca yang membutuhkan informasi mengenai masalah yang dibahas dalam Skripsi ini, khususnya terkait bidang Teknik Kimia.

Semarang, 8 Juli 2019

Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
LEMBAR PERSETUJUAN PEMBIMBING	ii
LEMBAR PENGESAHAN PENGUJI	iii
PERNYATAAN KEASLIAN.....	iv
MOTTO DAN PERSEMBAHAN.....	v
ABSTRAK.....	vi
KATA PENGANTAR.....	vii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR GAMBAR	xii
BAB 1 PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan	3
1.4 Manfaat	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Produk pada Pabrik <i>Paraxylene</i>	5
2.2 Metilasi Toluena.....	7
2.3 Aspen Plus Process Simulation Software	9
2.4 Properties Bahan Baku dan Produk.....	12

BAB III METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	15
3.2 Prosedur Kerja.....	15
3.3 Diagram Alir Penelitian	17

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Validasi Data.....	18
4.2 Spesifikasi Reaktor.....	19

BAB V KESIMPULAN

5.1 Simpulan	51
5.2 Saran.....	51

DAFTAR PUSTAKA	52
----------------------	----

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Kinetika Reaksi Metilasi Toluena.....	9
Tabel 2.2 Tipe-Tipe Model Termodinamika didalam Aspen Plus.....	10
Tabel 2.3 Jenis-Jenis Reaktor pada Aspen Plus	11
Tabel 4.1 Data Umpan Masuk Reaktor.....	20
Tabel 4.2 Data Densitas masing-masing komponen.....	20
Tabel 4.3 Data Viskositas masing-masing komponen	20
Tabel 4.4 Data Kapasitas Panas masing-masing komponen.....	21
Tabel 4.5 Data Konduktivitas Termal masing-masing komponen.....	22
Tabel 4.6 Data Umpan Masuk Reaktor.....	24
Tabel 4.7 Data Perhitungan Densitas Umpan	25
Tabel 4.8 Data Perhitungan Viskositas Umpan	27
Tabel 4.9 Data Perhitungan Kapasitas Panas Umpan	27
Tabel 4.10 Data Perhitungan Konduktivitas Termal Umpan.....	28
Tabel 4.11 Data Perhitungan Entalpi Pembentukan Standar Reaksi 1	29
Tabel 4.12 Data Perhitungan Entalpi Pembentukan Standar Reaksi 2	29
Tabel 4.13 Data Perhitungan Entalpi Pembentukan Standar Reaksi 3	29
Tabel 4.14 Data Perhitungan Entalpi Pembentukan Standar Reaksi 4	30
Tabel 4.15 Data Perhitungan Entalpi Pembentukan Standar Reaksi 5	30
Tabel 4.16 Data Konversi Reaksi Terhadap Panjang Tube	39

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Rumus Molekul <i>Paraxylene</i>	5
Gambar 2.2 Rumus Molekul <i>Metaxylene</i>	6
Gambar 2.3 Rumus Molekul <i>Orthoxylene</i>	7
Gambar 2.4 Model RPLUG	12
Gambar 3.1 Skema Rancang Penelitian	17
Gambar 4.1 Perbandingan antara Konversi Toluena Dari Hasil Simulasi Terhadap Data Penelitian	18
Gambar 4.2 Skema Alat Reaktor	19
Gambar 4.3 Pengaruh Panjang Tube dengan Konversi Reaksi	40
Gambar 4.4 Sketsa Head Reaktor	44

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Indonesia merupakan negara berkembang yang telah melakukan pembangunan di berbagai sektor, salah satunya adalah sektor industri. Sektor industri saat ini berperan besar dalam meningkatkan kemajuan negara. Salah satu sektor industri tersebut adalah industri kimia. Kebutuhan produk-produk petrokimia di Indonesia cenderung mengalami peningkatan setiap tahunnya, sehingga kebutuhan ekspansi di sektor petrokimia perlu dilakukan.

Salah satu bahan kimia yang sering digunakan adalah *paraxylene*. *Paraxylene* juga dikenal dimetil-benzena merupakan suatu cairan yang tak berwarna, mudah terbakar, beracun dan digolongkan ke dalam hidrokarbon aromatik, memiliki berat molekul 106,168 kg/kmol (Kirk dan Othmer, 2011). *Paraxylene* dapat diolah menjadi berbagai macam produk akhir seperti pembuatan *purified terephthalic acid* (PTA) dan *dimethyl terephthalate* (DMT). *Purified terephthalic acid* (PTA) dan *dimethyl terephthalate* (DMT) dapat diolah sebagai bahan industri plastik maupun tekstil yang dapat disebut perantara polyester, serta dapat digunakan sebagai bahan film, resin fiber, *plasticizer*, bahan campur bensin, zat pengemulsi untuk fungisida dan insektisida, bahan penggosok dan lain sebagainya. Kebutuhan *Paraxylene* di Indonesia mencapai 1,25 juta ton per tahun dan kapasitas *paraxylene* di dalam negeri 770.000 ton per tahun yang dipasok dari TPPI Tuban dan RFCC Cilacap (Kemenperin, 2018).

Produksi *paraxylene* dilakukan dalam *packed bed reactor* yang didalamnya direaksikan antara toluena, metanol, dan katalis ZSM-5 sehingga akan dihasilkan produk berupa *xylene* yaitu *m-xylene*, *o-xylene*, dan *paraxylene*. Perbandingan antara toluena dan metanol yang digunakan yaitu sebesar 2:1 (Ashraf, Chebbi, & Darwish, 2013). Toluena yang dibuat berlebih dan tidak ikut bereaksi akan tercampur dalam produk keluaran reaktor akan *direcycle* sehingga dapat digunakan kembali. Ada beberapa jenis reaktor didalam simulator software, sehingga dalam penelitian ini akan dipelajari lebih lanjut perancangan reaktor tipe *packed bed* sehingga didapatkan efisiensi alat maksimum.

1.2 Identifikasi Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah diuraikan sebelumnya, maka dapat diidentifikasi masalah sebagai berikut :

- a. *Paraxylene* adalah produk *intermediate* yang sering digunakan, akan tetapi pabrik *paraxylene* yang ada di Indonesia masih sedikit sedangkan kebutuhannya sangat banyak sehingga kebutuhan *paraxylene* dipenuhi dengan cara impor.
- b. *Packed bed reactor* digunakan untuk mereaksikan toluena dengan metanol sehingga terbentuk produk *paraxylene*.

1.3 Pembatasan Masalah

Dalam penelitian ini perlu dilakukan pembatasan masalah agar permasalahan tidak meluas dan dapat dibahas secara mendalam pada penelitian ini, diantaranya :

- a. Perancangan pabrik *paraxylene* di Indonesia perlu dilakukan karena kebutuhannya yang sangat banyak sedangkan produksi di Indonesia masih sedikit.
- b. *Packed bed reactor* merupakan alat yang akan dirancang untuk mereaksikan toluena dengan metanol sehingga terbentuk produk *paraxylene*.

1.4 Rumusan Masalah

Masalah yang dapat dirumuskan dari latar belakang yang telah diuraikan yaitu:

1. Bagaimana efisiensi proses produksi *paraxylene* dengan *packed bed reactor* menggunakan *simulator software*?
2. Bagaimana tahap-tahap perancangan *packed bed reactor* pada proses produksi *paraxylene* ?

1.5 Tujuan

Secara khusus penelitian ini bertujuan, antara lain :

1. Menentukan efisiensi proses produksi *paraxylene* dengan *packed bed reactor* menggunakan *simulator software*.

2. Mengetahui tahap-tahap perancangan *packed bed reactor* pada proses produksi *paraxylene*.

1.6 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan bermanfaat bagi:

1. Bagi lingkungan masyarakat

Memberi kontribusi dan wawasan dalam proses produksi *paraxylene* menggunakan *packed bed reactor* menggunakan *simulator software*.

2. Bagi IPTEK

Memberikan informasi bahwa proses produksi *paraxylene* menggunakan *packed bed reactor* menggunakan dapat dilakukan dengan *simulator software*.

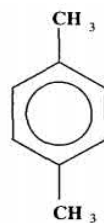
BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Produk Pada Pabrik *Paraxylene*

2.1.1 *Paraxylene*

Paraxylene merupakan bahan dasar untuk industri poliester. Ketika *paraxylene* dioksidasi dalam fase cair menghasilkan monomer penting yaitu asam tereftalat. Asam tereftalat murni (PTA) selanjutnya diproduksi menjadi poliester. Secara industri, *paraxylene* diperoleh melalui pemisahan isomer *xylene* yang diproduksi dalam proses petrokimia atau melalui Proses Disproporsionasi Toluena Selektif Mobile (MSTDP) dengan adsorpsi selektif atau teknik kristalisasi mendalam dingin. Proses produksi *paraxylene* yang paling ekonomis dan efisien menggunakan proses selektif metilasi toluena, metanol sebagai donor alkilasi, *paraxylene* sebagai produk utama, dan pemanfaatan toluena dapat dimaksimalkan dengan dihasilkannya lebih sedikit produk akhir (Wang et al., 2017). Adapun rumus molekul *paraxylene* ditunjukkan oleh Gambar 2.1.



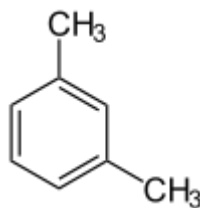
(Vogels, et al, 1996)

Gambar 2.1 Rumus Molekul *Paraxylene*

Paraxylene digunakan untuk membuat asam tereftalat (TPA), asam tereftalat murni (TPA) dan *dimethyl-terephthalate* (DMT). Ketiga bahan tersebut digunakan untuk digunakan untuk membuat *polietilen terephthalate* (PET). *Polietilen terephthalate* (PET) adalah bahan utama dalam berbagai serat dan film plastik dan dikenal sebagai komponen utama dari botol soda plastic, botol detergen, botol untuk berbagai pembersih rumah tangga dan make-up, dan digunakan dalam x-ray film *orographic*. Selain itu, kandungan PET juga terdapat dalam kemasan makanan dan juga berfungsi sebagai serat poliester seperti pakaian dan kain rumah (Kirk dan Othmer, 2011).

2.1.2 *Metaxylene*

M-xylene merupakan senyawa hidrokarbon aromatik yang tidak berwarna dan mudah terbakar, dimana termasuk salah satu dari tiga isomer *dimethylbenzene* yang dikenal sebagai *xylene*. M- adalah singkatan dari meta, yang menunjukkan bahwa dua gugus metil dalam *m-xylene* menempati posisi 1 dan 3 pada cincin benzena. Adapun rumus molekul *m-xylene* ditunjukkan oleh Gambar 2.2



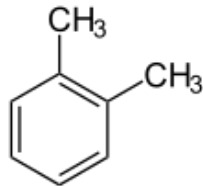
Gambar 2.2 Rumus Molekul *Meta-xylene*

Penggunaan utama *m-xylene* adalah dalam produksi asam *isophthalic*, yang digunakan sebagai monomer kopolimerisasi untuk mengubah sifat-sifat polietilena tereftalat. Konversi *m-xylene* menjadi asam *isophthalic*

memerlukan oksidasi katalitik. *M-xylene* juga digunakan sebagai bahan baku dalam pembuatan 2,4- dan 2,6- *xylydine* serta sebagai bahan kimia dengan volume yang lebih kecil (Kirk dan Othmer, 2011).

2.1.3 *Orthoxylene*

Orthoxylene adalah senyawa hidrokarbon aromatik dengan rumus $C_6H_4(CH_3)_2$ dengan dua substituent metil yang terikat pada atom karbon yang berdekatan dari cincin benzena. Adapun rumus molekul *o-xylene* dapat dilihat pada Gambar 2.3



Gambar 2.3 Rumus Molekul *Orthoxylene*

O-xylene sebagian besar digunakan dalam produksi *phthalic anhydride*, yang merupakan prekursor banyak bahan obat-obatan dan bahan kimia lainnya (Kirk dan Othmer, 2011).

2.2 Metilasi Toluena

Proses yang dipilih untuk pembuatan *paraxylene* yaitu dengan proses metilasi toluena. Proses reaksi metilasi toluena adalah proses mereaksikan toluena dengan metanol sebagai pemberi gugus alkil atau metil. Metilasi toluena diketahui terjadi di atas katalis asam, khususnya terhadap katalis jenis zeolit. Senyawa metanol akan kehilangan gugus metil dan menyisakan gugus hidroksi (-OH) yang akan berikatan dengan atom H dari toluena yang

membentuk senyawa air (H₂O). Atom H dilepaskan oleh toluena untuk menerima gugus metil yang di berikan oleh metanol sehingga membentuk senyawa *mixed xylene* yaitu ortho (o)-, meta (m)-, dan para (p)-*xylene*. Dalam reaksi ini toluena dan metanol akan dipecah menjadi *o-xylene*, *m-xylene*, *p-xylene* dan air. Katalis yang digunakan yaitu ZSM-5 karena sifat selektif bentuknya yang menghasilkan selektivitas *paraxylene* tinggi. Katalis ini memiliki situs asam internal dan eksternal yang bertindak sebagai situs reaksi.

Xylene yang diproduksi didalam pori-pori katalis harus berdifusi keluar dari pori-pori dalam. Koefisien difusi *paraxylene* 100 kali lipat dari *o-xylene* dan sekitar 1000 kali lipat dari *m-xylene* diatas suhu 250°C, sehingga produk *paraxylene* lebih cepat keluar dari pori-pori katalis. Reaksi yang terjadi pada metilasi toluena dapat dilihat pada persamaan (1) sampai (5).

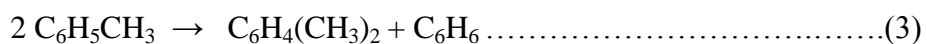
a. *Toluene methylation (main reaction):*



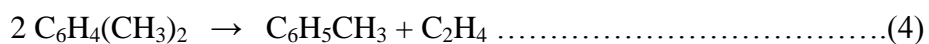
b. *Methanol dehydration:*

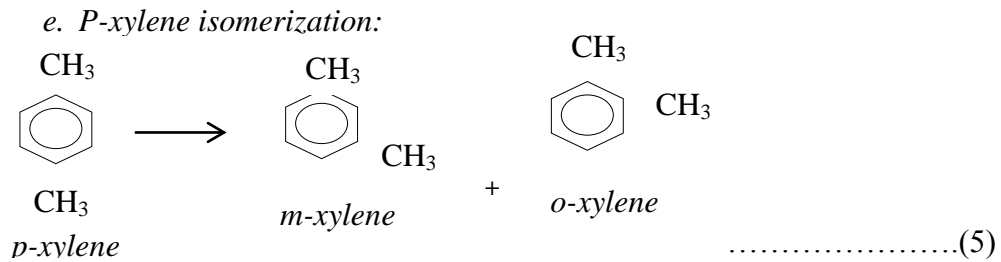


c. *Toluene diproportionation:*



d. *P-xylene dealkylation:*





Menurut Muhammad Tahir Ashraf, dalam jurnal *Process of p-Xylene Production by Highly Selective Methylation of Toluene* nilai k yang dapat digunakan dapat dilihat pada Tabel 1. Konstanta kecepatan reaksi (kn), dapat dilihat pada persamaan (8), dimana An adalah faktor pra-eksponensial, En adalah energi aktivasi, dan n (1-5) adalah nomor reaksi.

$$kn = An \exp \frac{-En}{RT} \dots\dots\dots (6)$$

Tabel 2.1 Kinetika Reaksi Metilasi Toluen

Parameter	k (mol/g.h.atm ²)	k Aspen (kgmol/sec m ³ . (N/m ²) ⁻¹)	En (Kj/mol)
k ₁	403	1.10481E-06	45.7
k ₂	1346	3.69E-06	50.6
k ₃	96.2	2.63728E-07	59
k ₄	0.3815	1.04586E-09	19.6
k ₅	46.94	1.28684E-07	48.9

2.3 Aspen Plus Process Simulation Software

2.3.1 Aspen Properti Model

Process simulation software memungkinkan seorang engineer memprediksi suatu proses menggunakan hubungan teknik dasar, seperti keseimbangan massa dan energi, fasa dan kesetimbangan kimia. *Process simulation software* memungkinkan seseorang untuk menjalankan banyak kasus, seperti melakukan analisis “what if”, analisis sensitivitas dan

melakukan optimasi sebuah proses. Dengan simulasi proses seseorang dapat merancang pabrik dengan lebih baik dan meningkatkan profitabilitas pabrik yang ada. Proses simulasi membantu keseluruhan aktivasi proses, dari penelitian dan pengembangan melalui perancangan proses untuk proses produksi. Beberapa contoh *software* simulasi proses yaitu *Aspen plus*, *Aspen Hysis*, *PRO II*, dan *CHEMCAD*. Pada penelitian ini digunakan *software Aspen plus 8.8*. *Aspen plus* merupakan produk dari grup simulator yang menggunakan strategi *sequential*, yang di dalam pemogramannya menggunakan representasi blok dan ikon untuk memecahkan masalah kesetimbangan massa dan energi (Report, 2018). Adapun tipe-tipe model termodinamika didalam *Aspen Plus* dapat dilihat pada Tabel 3.

Tabel 2.2 Tipe-tipe model termodinamika didalam *Aspen Plus*

Model	Penggunaan	Contoh penggunaan
NRTL	Untuk memprediksi <i>Vapour Liquid Equilibrium</i> (VLE), <i>Liquid-liquid Equilibrium</i> (LLE), <i>Vapour Liquid-liquid equilibrium</i> (VLLE), sistem multikomponen	<i>Aqueous organics</i> (<i>methanol-acetone</i>)
Peng-Robinson	Dikembangkan untuk perhitungan <i>Vapour Liquid Equilibrium</i> (VLE) sistem hidrokarbon yang tidak polar	Etanol-air
Wilson	Untuk sistem multikomponen dengan parameter biner, tidak dapat digunakan untuk perhitungan <i>Liquid-liquid Equilibrium</i> (LLE)	Alkohol-alkohol-fenol
Margules	Menggunakan metode Gibbs excess energy, cocok untuk <i>quick estimation</i> dan interpolasi	Sistem alkohol, keton, eter dan sistem aromatic
Van Laar	Untuk memprediksi <i>Liquid-liquid Equilibrium</i> secara umum, kurang akurat untuk sistem dengan <i>halogenated hidrokarbon</i> ataupun	Isobutene-furfural

	alcohol	
UNIQUAC	Dapat mempresentasikan dengan baik <i>Vapour Liquid Equilibrium</i> (VLE), <i>Liquid-liquid Equilibrium</i> (LLE), <i>Vapour Liquid-liquid equilibrium</i> (VLLE), untuk molekul yang mempunyai ukuran atau bentuk yang sangat berbeda seperti campuran yang mengandung polimer	untuk campuran yang mengandung air, alkohol, nitril, keton, aldehid, halogenated hidrokarbon dll.

Model NRTL dipilih pada penelitian ini karena senyawa yang akan dipisahkan merupakan senyawa multikomponen (Aspentech et al, 2001).

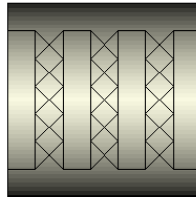
2.3.2 Pemilihan Jenis Reaktor

Aspen memiliki banyak pilihan reaktor untuk mereaksikan bahan baku menjadi produk. Didalam Aspen terdapat beberapa opsi unit operasi reaktor seperti RStoic, RYield, REquil, RGibbs, RCSTR dan RPLUG.

Tabel 2.3 Jenis-jenis Reaktor pada Aspen Plus

Jenis Reaktor	Kegunaan
RStoic	Untuk perhitungan reaksi yang reaksi stoikiometrinya diketahui tetapi kinetika reaksinya tidak tersedia
RYield	Tidak membutuhkan informasi persis tentang reaksi stoikiometri atau kinetika, tidak ada panas yang dapat dihitung karena reaksi stoikiometri tidak diketahui
REquil	Untuk perhitungan reaksi dimana satu atau lebih reaksi yang terlibat adalah reaksi kesetimbangan, blok membutuhkan informasi khusus tentang reaksi stoikiometri, sifat fisis kimia dan reaksi fasa equilibrium
RGibbs	Untuk perhitungan reaksi tanpa membutuhkan reaksi stoikiometri terperinci atau yield, perhitungan didasarkan pada meminimalkan energi Gibbs pada system
RCSTR	Digunakan pada reaksi homogen dimana semua bahan baku dan katalisnya berfase cair, atau reaksi antara cair dengan cair dan gas dengan katalis cair
RPLUG	Digunakan untuk reaksi heterogen misalnya mereaksikan bahan baku gas dengan katalis padat

Model blok RPLUG dipilih dalam simulasi ini karena reaksi yang digunakan dalam pembuatan *paraxylene* merupakan reaksi heterogen yang mereaksikan komponen berfase gas dengan katalis padat.



Gambar 2.4 Model RPLUG

Model blok RPLUG dipilih dalam simulasi ini karena memerlukan spesifikasi khusus seperti suhu, reaksi kesetimbangan, kinetika, berat katalis, dan penggunaan katalis padat, serta karena umpan yang masuk berfase gas (Hussain, 2010).

2.4 Properties Bahan Baku dan Produk

2.4.1 Spesifikasi Bahan Baku

1. Toluena

- Berat Molekul : 92,141 g/mol
- Titik Didih (P = 1 atm) : -111°C
- Titik Beku (P = 1 atm) : -95°C
- *Flash Point* : -4°C
- *Fire Point* : 480°C
- Densitas pada 25 °C : 0,87 kg/m³
- Temperatur Kritis : 318,64°C

- Volume Kritis : 0,3161 /mol
- Panas Pembakaran pada 25 °C tekanan konstan : 39130,3 kJ/mol
- Panas Penguapan pada 25 °C : 37,99 kJ/mol
- Panas Pembentukan delta ΔH_f (kcal/mol)
 - Gas : 11,973
 - Cair : 2,867
- Entropi, S (kJ/ K)
 - Gas : 319,7
 - Cair : 219,6
- $\Delta G_{f_{298}}$: 29,199 kcal/mol

Sumber: (www.exxonmobilchemical.com/en)

2. Metanol

- Fasa (P = 1 atm ; T= 25 °C) : cair
- Titik Didih (P = 1 atm) : 64,85°C
- Titik Beku (P = 1 atm) : -97,8°C
- Densitas (25 °C) : 0,78664 g/cm³
- Indeks Bias (20 °C) : 1,3287
- Viskositas (25 °C) : 0,5513 mPa s
- Temperatur Kritis : 240°C
- Tekanan Kritis : 78,5 atm
- Panas Penguapan (64,7 °C) : 8340 kal/mol
- *Spesific Gravity* : 0,79 (Air=1)
- $\Delta H_{f_{298}}^0$: -48.24 kcal/mol

- ΔG_{298}^0 : -39.042 kcal/mol

Sumber: (Perry, 1997)

2.4.2 Spesifikasi Produk

1. *Paraxylene*

- Berat Molekul : 106.168 g/mol
- Titik Didih (P = 1 atm) : 138°C
- Titik Beku (P = 1 atm) : 13°C
- *Flash Point* : 27°C
- Densitas pada 25 °C : 0,86 kg/m³
- Panas Penguapan pada 35 °C : 42.40 kJ/mol

Sumber: (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/p-xylene>)

BAB V

KESIMPULAN

5.1 SIMPULAN

- 1 Proses produksi *paraxylene* dengan metode metilasi toluena menggunakan alat utama reaktor *packed bed* jenis *fixed bed multitube* karena reaksinya dalam fase gas dan katalis padat.
- 2 Kondisi operasi *packed bed reactor* adalah pada tekanan 3 bar dan suhu operasi 400°C.
- 3 Hasil perancangan *packed bed reactor* adalah dengan diameter 2,6494 meter, panjang total 11,5864 meter, dan jumlah *tube* 1102.

3.1 SARAN

Beberapa saran untuk meningkatkan hasil penelitian yang akan datang adalah:

1. Perhitungan perancangan *packed bed reactor* dengan jumlah katalis yang berbeda perlu dilakukan lebih lanjut untuk mengetahui efisiensi *packed bed reactor*.
2. Perancangan *packed bed reactor* dengan kondisi operasi yang berbeda dilakukan lebih lanjut.

DAFTAR PUSTAKA

- Aboul-gheit, A. K., Aboul-enein, A. A., Ghoneim, S. A., Hanafi, S. A., & Awadallah, A. E. (2013). Catalytic para-xylene maximization . Part X : Toluene disproportionation on HF promoted H-ZSM-5 catalysts. *Egyptian Journal of Petroleum*, 21(2), 119–124. <https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2012.11.009>
- Ashraf, M. T., Chebbi, R., & Darwish, N. A. (2013). Process of p - Xylene Production by Highly Selective Methylation of.
- Brownell, Lloyd E, Young, Edwin H. 1959. *Process Equipment Design: Process Vessel Design*. John Wiley & Sons, Inc. New York
- Guide, A. (2018). Aspen Plus : Process Simulation for Chemicals.
- Himmelblau, D.M. and Riggs, J.B. 2004. *Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering*. Prentice Hall Professional Teacher References.,United State of America.
- Hussain. (2010). Classifications. No Title, 95–107.
- Kamal, Al Malah. (2017). Chemical Engineering Applications.
- Kementerian Perindustrian Republik Indonesia. 2018. Investasi Sektor Petrokimia Butuh Dana US\$ 6,8 Miliar. Diakses di [https://www.kemenperin.go.id/investasi-sektor-petrokimia-butuh-dana-US\\$-6,8Miliar](https://www.kemenperin.go.id/investasi-sektor-petrokimia-butuh-dana-US$-6,8Miliar).
- Kern, Donald Q. 1983. *Process Heat Transfer*. The McGraw-Hill Companies, Inc. Tokyo.
- Kirk, R.E. dan Othmer, D.F. 2010. Encyclopedia of Chemical Engineering Technology. New York: John Wiley and Sons Inc.
- Petrochemistry, T. (n.d.). GTC TECHNOLOGY WHITE PAPER The Petrochemistry of Paraxylene The Petrochemistry of Paraxylene.
- Perry, R.H and Green, D.W. 1999. *Perry's Chemical Engineer's Handbook*, 7th edition. Mc Graw-Hill Book Co. New York.
- Perry, Robert H, Green, Don W. 1997. *Perry's Chemical Engineers'*, 7th ed. The McGraw-Hill Companies, Inc. New York.
- Plus, A., Properties, A., Suite, A. E., Technology, A., Park, T. C., Systems, O., ... Park, T. C. (n.d.). Part Number : Aspen Physical Property System 11 . 1 September 2001.
- Pubchem. 2018. *Methanol*. Diakses di <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/18177619>
- Pubchem. 2018. *Paraxylene*. Diakses di <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/18177619>
r44
- Report, T. (2018). Design , Implementation , and Simulation of Control Systems for Extractive and Recovery Distillation Columns using Aspen Plus and Aspen Dynamics.
- Reports, A. S. (2016). Model to Monitor , Predict and Control Impulse Input Response of Distillate and Reflux Ratio of A Distillation

- Column. <https://doi.org/10.15192/PSCP.ASR.2016.13.1.2942>
- Saito, S., & Michishita, T. (1971). Separation Of Meta- And Para-Xylene Mixture By Distillation Reactions ' Accompanied By Chemical, 4, 37–43.
- Silva, M. S. P., Mota, J. P. B., & Rodrigues, A. E. (2012). Fixed-bed adsorption of aromatic C 8 isomers: Breakthrough experiments , modeling and simulation. *Separation and Purification Technology*, 90, 246–256. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2012.02.034>
- Sotelo, J. L., Uguina, M. A., Valverde, J. L., & Serrano, D. P. (1993). Kinetics of Toluene Alkylation with Methanol over Mg-Modified ZSM-5, 2548–2554.
- SRS Engineering Corporation. (2016). Distillation Columns- Fractioning Columns.
- University, C. (1993). Kinetics of Toluene Disproportionation over Unmodified and Modified, (i), 49–55.
- Vogels, L. J. P., Grimbergen, R. F. P., Strom, C. S., Roberts, S. A., & Blanks, R. F. (1996). Chemical Physics On the theoretical and experimental morphology of paraxylene, 203, 69–80.
- Wang, C., Zhang, Q., Zhu, Y., Zhang, D., Chen, J., & Chiang, F. (2017). p-Xylene selectivity enhancement in methanol toluene alkylation by separation of catalysis function and shape-selective function. *Molecular Catalysis*, 433, 242–249. <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2016.12.007>
- Walas, Stanley M. 1990. *Chemical Process Equipment: Selection and Design*. Butterworth-Heinemann. Washington.
- Yaws, C. L. 1999. *Chemical Properties Handbook: Physical, Thermodynamic, Environmental, Transport, Safety, and Health Related Properties for Organic and Inorganic Chemicals*. The McGraw-Hill Companies, Inc. New York.