**EFFEK SUHU**

 Pada bagian terdahulu telah dibahas cara-cara perhitungan untuk suatu reaktor baik reaktor batch maupun reaktor alir. Perhitungan dilakukan dengan anggapan bahwa operasi berjalan pada suhu tetap, sehingga perhitungan hanya ada satu variabel saja yaitu konsentrasi. Apabila pada saat reaksi effek panas diperhitungkan maka ada kemungkinan suhu akan berubah terhadap waktu ( waktu reaksi untuk reaktor batch dan waktu tinggal untuk reaktor kontinyu. Sehingga perhitungannya menjadi lebih komplek karena harus menghitung neraca energi dan meninjau pengaruh panas terhadap laju reaksi.

1. **PANAS REAKSI**

Panas reaksi (∆H) merupakan ukuran tentang banyaknya panas yang diserap atau dikeluarkan pada saat reaksi berlangsung. Misalnya untuk reaksi sebagai berikut:

aA + bB → rR + sS ∆Hr kkal/mol

Panas reaksi ∆Hr didefinisikan sebagai panas yang dibutuhkan/ dihasilkan kalau a mol A bereaksi dengan b mol B membentuk r mol R dan s mol S. Besarnya panas reaksi ini, selain tergantung pada suhu dan tekanan operasi juga tergantung pada keadaan sistem yaitu siste terbuka atau tertutup.

1. **Sistem Terbuka**

 P1,V1 P1,V1

 Inlet Reaktor outlet

 U1,m1, U1,m1,

 H1,T1  H1,T1

 Menurut termodnamika: panas reaksi untuk sistem terbuka adalah sama dengan perbedaan entalpi produk total dengan entalpi reaktan total:

 

dengan: hi= entalpi molar komponen i

∆Hr= (+) bila entalpi produk total > entalpi reaktan total, sehingga selama reaksi sejumlah panas harus ditambahkan = reaksi endotermis

∆Hr= (-) bila entalpi produk total < entalpi reaktan total, sehingga selama reaksi sejumlah panas akan dibebaskan = reaksi eksotermis

Data-data nilai panas reaksi untuk reaksi tertentu dapat diperoleh dari tabel termodinamika, tetapi tidak tersedia maka dapat dihitung menggunakan:

1. Entalpi pembentukan
2. Entalpi pembakaran
3. **Sistem Tertutup**

Sistem tertutup dapat dibagi menjadi 2 kategori:

1. Sistem tertutup pada tekanan konstan

Pada sistem ini panas reaksi tepat dihitung sama dengan yang diturunkan pada sistem terbuka yaitu panas reaksi adalah beda antara entalpi produk total dengan entalpi reaktan total.

b.Sistem tertutup pada volume konstan

 Menurut termodinamika panas reaksi untuk sistem tertutup pada volume konstan adalah perbeedaan energi dalam antara produk dan reaktan:

 

 dengan: ui= energi dalam molar komponen i

1. **Estimasi Efek Panas**

Penentuan panas reaksi biiasanya dilakukan di dalam suatu alat yang disebut *bomb calorimeter*. Alat ini berbentuk suatu sistem tertutup bervolume konstan sehingga menghasilkan panas reaksi sebagai perubahan energi dalam. Perubahan panas reaksi pada volume konstan menjadi tekanan konstan dipakai korelasi:

H= U+ pV

 Perubahan entalpi pada suhu dan tekanan konstan:

 ∆HP,T = ∆UP,T + p (∆V)T

Dengan ∆UP,T: perubahan energi dalam pada suhu dan tekanan konstan

Untuk gas ideal dan perubahan tekanan di dalam *bomb calorimeter* tidak terlalu besar maka:

 ∆UP,T = ∆UV,T

Sehingga:

 ∆HP,T = ∆UV,T + p (∆V)T

1. Jumlah mol dalam fase gas tetap

Apabila selama reaksi jumlah mol total adalah tetap:

 ∆HP,T = ∆UV,T

1. Gas mengikuti hukum gas ideal

Campuran gas di dalam reaktor mengikuti hukum gas ideal

p (∆V)T= ∆nRT

sehingga: ∆HP,T = ∆UP,T + p (∆V)T menjadi

∆HP,T = ∆UP,T + ∆nRT

Di dalam perhitungan praktis harga p(∆V)T umumnya kecil dibanding ∆UP,T sehingga harga p(∆V)T dapat diabaikan.

1. **Pengaruh suhu terhadap panas reaksi**

Panas reaksi pada suhu T2 bisa ditentukan berdasar data pada suhu T1 yang diketahui dengan menggunakan korelasi:



 Dengan ∆Cp=ΣυiCpi

 Cpi= panas jenis komponen i

 ∆HoT1,∆HoT2= panas reaksi molar pada suhu T1 dan T2

Bila pada T1 dan T2 panas jenis masing-masing komponen adalah konstan,maka :

 

1. Konstanta Kesetimbangan Reaksi

Pada reaksi reversible selain pengaruh suhu terhadap laju reaksi, yang harus diperhitungkan dalam perancangan reaktor adalah batasan banyaknya produk yang bisa dihasilkan. Batasan tersebut dinyatakan dalam suatu konstante yang disebut konstanta kesetimbangan K.

 k1

 aA + bB rR + sS

 k2

Konstanta keseimbangan K adalah:



Dengan a= aktivitas

Besarnya harga konstanta kesetimbangan K dapat dperoleh dengan menggunakan perubahan energi bebas standar ∆G0:



 

Hubungan antara konstante kesetimbangan reaksi, panas reaksi dan suhu dinyatakan dengan persamaan Van’t Hoff:



Dua kondisi yang dapat ditinjau dengan mengamati pengaruh T terhadap K:

* Jika ∆H konstan pada rentang T1dan T2 maka:

 

* Jika ∆H merupakan fungsi suhu maka:



 Kemudian disubstitusikan ke persamaan:



Di dalam perhitungan praktis pengertian aktivitas jarak digunakan, tetapi dinyatakan dalam besaran tekanan, konsentrasi dan fraksimole.

1. Gas Ideal

 Untuk gas ideal aktivitas sama dengan tekanan parsial, sehingga:



Bila dinyatakan dalam konsentrasi atau fraksi mol berdasar hubungan-hubungan berikut:

 PA=yAP

PA=CART

Sehingga:









1. Gas non ideal

Aktivitas sama dengan fugasitas (f). Menurut hukum Lewis dan Randall hubungan antara fugasitas dan tekanan dihubungkan menurut korelasi:





Kasus:

Reaksi fase gas: C2H6 (g) C2H4 (g) + H2 (g) berlangsung pada tekanan 1 atm dan suhu 1000 K. Mula-mula hanya terdapat C2H6 murni. Reaktan dan produk dianggap berkelakuan sebagai gas ideal. Hitunglah:

1. Konstanta kesetimbangan
2. Konversi maksimum Xe

yang dapat dicapai pada kondisi tersebut. Data-data disajikan pada tabel berikut:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Komponen | ∆G298o, KJ/mol | ∆H298o, KJ/mol | Cp, KJ/(mol.K) |
| C2H6 (g) | -32,886 | -84,667 | 0,0096+8,37.10-5 T |
| C2H4 (g) | 68,124 |  52,3 | 0,0117+12,55.10-5 T |
| H2 (g) |  0 |  0 | 0,0289+1,67.10-5 T |

