

Identifikasi *Rate Determining Step* (RDS) pada Reaksi Hidrogenasi *i*-Oktena menjadi *i*-Oktana dengan Katalis Ni/Al₂O₃

Muhammad Fadhillah Ansyari^{a*}, Teguh Budi Santoso^b

^{a,b}Program Studi Teknik Kimia Polimer, Politeknik STMI Jakarta, Indonesia, 10510

*Corresponding author: fadhillahansyari@stmi.ac.id

Diterima: 4 Juli 2024, Direvisi: 17 September 2024, Disetujui: 19 September 2024

Abstrak

Hidrogenasi merupakan proses penting dalam industri kimia, digunakan untuk mereduksi ikatan rangkap dalam senyawa organik, menghasilkan senyawa yang lebih jenuh. Salah satu aplikasinya adalah pada reaksi hidrogenasi *i*-oktena menjadi *i*-oktana, yang merupakan komponen penting dalam bahan bakar. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi tahap penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) dalam reaksi hidrogenasi *i*-oktena dengan katalis Ni/Al₂O₃. Metode yang digunakan melibatkan analisis kinetika reaksi melalui simulasi menggunakan *software* Polymath, yang memungkinkan pemodelan data eksperimen secara akurat. Hasil penelitian menunjukkan bahwa reaksi yang terjadi pada permukaan katalis adalah tahap penentu laju, dengan koefisien determinasi sebesar 0,99, menunjukkan kecocokan tinggi antara model dan data eksperimen. Penemuan ini diharapkan dapat memberikan kontribusi dalam pengembangan katalis yang lebih efisien dan optimasi kondisi operasi dalam industri hidrogenasi.

Kata kunci: hidrogenasi, katalis, kinetika, polymath, reaksi

Abstract

*Hydrogenation is a crucial process in the chemical industry, used to reduce double bonds in organic compounds, resulting in more saturated compounds. One of its applications is in the hydrogenation of *i*-octene to *i*-octane, which is a key component in fuel. This study aims to identify the rate-determining step (RDS) in the hydrogenation of *i*-octene using a Ni/Al₂O₃ catalyst. The method involves reaction kinetics analysis through simulations using Polymath software, allowing for accurate modeling of experimental data. The results show that the surface reaction on the catalyst is the rate-determining step, with a determination coefficient of 0.99, indicating a high degree of fit between the model and experimental data. This finding is expected to contribute to the development of more efficient catalysts and the optimization of operating conditions in industrial hydrogenation processes.*

Keywords: hydrogenation, catalyst, kinetic, polymath, reaction

1. PENDAHULUAN

Hidrogenasi merupakan reaksi antara hidrogen dengan senyawa organik, dimana terjadi penambahan hidrogen secara langsung pada ikatan rangkap dari molekul yang tidak jenuh sehingga dihasilkan suatu produk yang jenuh (Pasyah et al., 2019). Hidrogenasi sering dilakukan dalam sintesis senyawa organik di skala laboratorium ataupun industri. Dalam pengaplikasiannya, metode yang paling sering digunakan dan telah diterapkan secara luas untuk proses reduksi substansi kimia adalah hidrogenasi katalitik (Muharja et al., 2018).

Katalis yang digunakan dalam proses hidrogenasi dibagi menjadi dua yaitu katalis homogen dan heterogen. Namun, katalis yang umum digunakan saat ini adalah katalis heterogen (Jinga et al., 2021). Hal ini dikarenakan katalis heterogen lebih unggul dibandingkan dengan katalis homogen, seperti stabilitas katalis, kondisi reaksi yang berlaku, kemudahan proses pemisahan produk dari katalis, dan kemampuannya mereduksi gugus yang sulit direduksi seperti senyawa aromatik (Prasetiawan et al., 2022).

Isooktana atau 2,2,4-Trimetilpentana adalah senyawa organik dengan rumus kimia $(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ yang merupakan isomer dari oktana (C_8H_{18}) (Pyo et al., 2018). Senyawa isooktana berwujud cairan jernih dan berbau seperti bensin, dengan berat molekul 114,23, titik didih 98-99°C, titik leleh -107°C, dan densitas 0,69 gr/cm³.

Reaksi isooktana menjadi isooktana merupakan salah satu aplikasi dari proses hidrogenasi katalitik (Idriss et al., 2015). Isooktana merupakan komponen penting penyusun bahan bakar atau bensin (Susanti et al., 2010). Isooktana penting karena dapat meningkatkan daya tahan terhadap *knocking* dari suatu bahan bakar (Veriansyah et al., 2008). Terlebih lagi, senyawa isooktana yang terkandung dalam bensin juga berfungsi untuk meningkatkan efisiensi pembakaran sehingga energi yang dihasilkan menjadi lebih besar (Erlita et al., 2022). Oleh karena itu, kandungan isooktana dijadikan sebagai parameter dalam mengukur kualitas suatu bahan bakar yang biasa disebut sebagai nilai oktan (Iskandar & Pangestu, 2017).

Katalis Ni/Al₂O₃ telah lama dikenal sebagai katalis yang efektif untuk berbagai reaksi hidrogenasi (Bahar & Elvaswer, 2023). Nikel (Ni) berfungsi sebagai situs aktif untuk reaksi, sementara alumina (Al₂O₃) menyediakan dukungan struktural yang stabil dan meningkatkan distribusi serta ketersediaan situs aktif nikel (Anggini & Muldarisnur, 2021). Kombinasi ini memungkinkan peningkatan aktivitas katalitik dan stabilitas termal, yang sangat penting dalam proses hidrogenasi yang beroperasi pada suhu dan tekanan tinggi (Hemmati et al., 2020).

Salah satu aspek kunci dalam memahami dan mengoptimalkan reaksi hidrogenasi adalah identifikasi tahap penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) (Budiyanto et al.,

2021). RDS adalah tahap paling lambat dalam mekanisme reaksi yang menentukan kecepatan keseluruhan reaksi (Raharjo et al., 2020). Mengetahui RDS dalam hidrogenasi i-oktana menjadi i-oktana sangat penting untuk mengembangkan katalis yang lebih efisien dan kondisi operasional yang optimal (Salim et al., 2014). Dengan memahami RDS, para peneliti dapat memodifikasi sifat katalis dan kondisi reaksi untuk mempercepat tahap ini, sehingga meningkatkan keseluruhan laju reaksi (Widodo et al., 2015).

Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi dan menentukan RDS dalam reaksi hidrogenasi i-oktana menjadi i-oktana menggunakan katalis Ni/Al₂O₃. Dengan pendekatan eksperimental dan analisis kinetika, studi ini diharapkan dapat memberikan wawasan mendalam tentang mekanisme reaksi dan faktor-faktor yang mempengaruhi RDS. Penemuan ini tidak hanya akan berkontribusi pada pengembangan katalis yang lebih efisien tetapi juga akan memperluas pemahaman tentang dinamika reaksi hidrogenasi, yang pada akhirnya dapat diaplikasikan pada berbagai reaksi hidrogenasi industri lainnya.

2. METODE PENELITIAN

Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi tahap penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) dalam reaksi hidrogenasi i-oktana menjadi i-oktana menggunakan katalis Ni/Al₂O₃. Bahan utama yang digunakan dalam penelitian ini adalah i-oktana sebagai reaktan dan katalis Ni/Al₂O₃ sebagai katalis heterogen. i-oktana yang digunakan memiliki kemurnian sebesar 99%, dengan berat molekul 114,23 g/mol dan densitas 0,690 g/cm³. Sementara itu, katalis Ni/Al₂O₃ memiliki komposisi 16,6% nikel dengan luas permukaan spesifik sebesar 0,37 cm³/g dan volume pori rata-rata sebesar 0,8 cm³/g. Alumina (Al₂O₃) berfungsi sebagai pendukung

struktural yang stabil, meningkatkan distribusi situs aktif nikel, yang bertindak sebagai pusat katalitik dalam reaksi hidrogenasi ini.

Variabel-variabel yang divariasikan dalam penelitian ini mencakup suhu reaksi, tekanan hidrogen, konsentrasi i-oktena, dan waktu reaksi. Suhu reaksi divariasikan pada rentang 150°C hingga 250°C untuk mengeksplorasi pengaruh suhu terhadap laju reaksi. Tekanan hidrogen dipertahankan pada 1 hingga 10 atm, sedangkan konsentrasi awal i-oktena divariasikan dari 0,1 M hingga 1 M. Selain itu, waktu reaksi juga diatur dalam interval 30 menit hingga 5 jam untuk mengetahui bagaimana durasi reaksi mempengaruhi laju hidrogenasi. Pengaruh setiap variabel terhadap laju reaksi hidrogenasi dianalisis secara menyeluruh untuk menentukan variabel mana yang paling mempengaruhi laju dan tahap penentu laju.

Data yang dikumpulkan mencakup konsentrasi i-oktena, hidrogen, dan i-oktana pada setiap titik sampling. Sampling dilakukan setiap 15 menit selama reaksi berlangsung untuk memastikan adanya data yang memadai dan akurat untuk dianalisis. Pengujian sampel dilakukan menggunakan kromatografi gas (GC), yang secara akurat menganalisis komposisi produk reaksi pada setiap titik waktu. Standar yang digunakan untuk pengujian kromatografi gas adalah ASTM D6730, yang merupakan standar internasional untuk pengujian hidrokarbon. Untuk memastikan keakuratan hasil, setiap sampel diuji minimal tiga kali.

Dalam hal model kinetik, penelitian ini menggunakan mekanisme Horiuti-Polanyi, yang merupakan model umum untuk menggambarkan reaksi hidrogenasi. Mekanisme ini melibatkan beberapa tahap elementer, yaitu adsorpsi i-oktena dan hidrogen pada permukaan katalis, reaksi permukaan di mana hidrogen berikatan

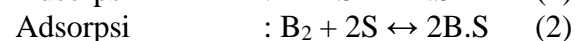
dengan i-oktena teradsorpsi, dan desorpsi produk i-oktana dari permukaan katalis. Persamaan laju untuk masing-masing tahap dijabarkan menggunakan pendekatan Langmuir-Hinshelwood, di mana adsorpsi i-oktena dan hidrogen dianggap mengikuti isotherm Langmuir.

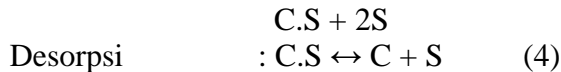
Model kinetik yang digunakan dalam penelitian ini dioptimalkan menggunakan *software* Polymath. Perangkat lunak ini memungkinkan analisis regresi non-linear untuk mengestimasi parameter kinetika seperti konstanta laju dan koefisien adsorpsi. Melalui simulasi dan optimasi model, dapat ditentukan parameter-parameter yang paling signifikan mempengaruhi laju reaksi.

Validasi model kinetik dilakukan dengan membandingkan hasil simulasi dengan data eksperimen yang dikumpulkan. Hasil analisis menunjukkan koefisien determinasi (R^2) sebesar 0,99, yang mengindikasikan kesesuaian yang sangat tinggi antara model kinetik dan data eksperimen. Selain itu, uji sensitivitas dilakukan untuk mengevaluasi pengaruh variasi suhu dan tekanan terhadap laju reaksi. Hasil uji sensitivitas menunjukkan bahwa suhu reaksi memiliki pengaruh yang paling signifikan terhadap laju hidrogenasi, di mana kenaikan suhu menyebabkan peningkatan laju reaksi yang lebih cepat dibandingkan dengan variabel lainnya.

Dengan pendekatan eksperimental dan analisis yang menyeluruh, penelitian ini memberikan gambaran yang jelas mengenai faktor-faktor yang mempengaruhi RDS dalam reaksi hidrogenasi i-oktena menjadi i-oktana.

Model kinetika dikembangkan berdasarkan mekanisme Horiuti-Polanyi yang dapat dijabarkan sebagai berikut:





Keterangan:

A/TMP = i-oktana

B₂ = hidrogen

C = i-oktana.

Berdasarkan keempat tahap mekanisme reaksi, persamaan laju untuk masing – masing tahap seperti berikut:

$$r_1 = k_A P_A C_V - k_{A'} C_{A.S} \quad (5)$$

$$r_1 = k_A \left(P_A C_V - \frac{C_{A.S}}{K_A} \right)$$

$$r_2 = k_B P_B C_V^2 - k_{B'} C_{B.S}^2 \quad (6)$$

$$r_2 = k_B \left(P_B C_V^2 - \frac{C_{B.S}^2}{K_B} \right)$$

$$r_3 = k_S C_{A.S} C_{B.S}^2 - k_{S'} C_{C.S} C_V^2 \quad (7)$$

$$r_3 = k_S \left(C_{A.S} C_{B.S}^2 - \frac{C_{C.S} C_V^2}{K_S} \right)$$

$$r_4 = k_D C_{C.S} - k_{D'} P_C C_V \quad (8)$$

$$r_4 = k_D \left(C_{C.S} - \frac{P_C C_V}{K_D} \right)$$

Keterangan:

$K_A = k_A/k_{A'}$; $K_B = k_B/k_{B'}$; $K_S = k_S/k_{S'}$; $K_D = k_D/k_{D'}$.

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1 Penentuan Persamaan Kinetika dengan Eksperimen

Tabel 1. Data Kinetika Reaksi Hidrogenasi Isooktana menjadi Isooktana

Run	Rate (mol/g.h)	Partial Pressure (atm)		
		H ₂	i-Octene	i-Octane
1	0,0362	1	1	0
2	0,0239	1	1	1
3	0,039	3	1	1
4	0,0351	1	3	1
5	0,0114	1	1	3
6	0,0534	10	1	0
7	0,028	1	10	0
8	0,0033	1	1	10
9	0,038	2	2	2
10	0,009	1	1	4
11	0,0127	0,6	0,6	0,6
12	0,0566	5	5	5

Selanjutnya dilakukan analisis untuk masing-masing pengaruh reaktan/produk terhadap laju reaksi untuk menentukan persamaan kinetika reaksi

3.1.1 Pengaruh Hidrogen terhadap Persamaan Laju

Untuk laju 5 dan 6 menunjukkan ketergantungan i-octane pada produk. I-Octane teradsorpsi ke permukaan. Peningkatan tekanan parsial mengakibatkan laju reaksi menurun, sehingga persamaan laju reaksi:

$$-r_A \approx \frac{1}{1 + K_C P_C + \dots} \quad (9)$$

3.1.2 Pengaruh Isooktana terhadap Persamaan Laju

Untuk laju 6 dan 7 menunjukkan ketergantungan hidrogen pada produk. Hidrogen teradsorpsi ke permukaan. Peningkatan tekanan parsial mengakibatkan laju reaksi meningkat, sehingga persamaan laju reaksi:

$$-r_A \approx \frac{P_A}{1 + K_A P_A + \dots} \quad (10)$$

3.1.3 Pengaruh Isooktana terhadap Persamaan Laju

Untuk laju 6 dan 8 menunjukkan ketergantungan i-octene pada produk. Peningkatan tekanan parsial mengakibatkan laju reaksi meningkat, sehingga:

$$-r_A \approx P_B \quad (11)$$

Untuk laju 5 dan 11 menunjukkan ketergantungan i-octene pada produk. I-Octene teradsorpsi ke permukaan. Peningkatan tekanan parsial mengakibatkan

$$-r_A \approx \frac{P_B}{1 + K_B P_B + \dots} \quad (12)$$

Dari persamaan diatas, maka didapatkan persamaan laju reaksi:

$$-r_A \approx \frac{k P_A P_B}{(1 + K_A P_A + K_B P_B + K_C P_C)^2} \quad (13)$$

3.2 Persamaan Laju Reaksi setiap Reaksi Elementer

3.2.1 Persamaan Laju Reaksi Adsorpsi Isooktena

$$r_1 = k_1 P_{TMP} C_v - k_{-1} C_{TMP.S} \quad (14)$$

$$r_1 = k_1 \left(P_{TMP} C_v - \frac{C_{TMP.S}}{K_1} \right) \quad (15)$$

Ketika $r_1 = 0$, persamaan laju reaksi berubah menjadi:

$$P_{TMP} C_v = \frac{C_{TMP.S}}{K_1} \quad (16)$$

$$C_{TMP.S} = K_1 P_{TMP} C_v \quad (17)$$

3.2.2 Persamaan Laju Reaksi Adsorpsi Hidrogen

$$r_2 = k_2 P_{H_2} C_v^2 - k_{-2} C_{H.S}^2 \quad (18)$$

$$r_2 = k_2 \left(P_{H_2} C_v^2 - \frac{C_{H.S}^2}{K_2} \right) \quad (19)$$

Ketika $r_2 = 0$, persamaan laju reaksi berubah menjadi :

$$P_{H_2} C_v^2 = \frac{C_{H.S}^2}{K_2} \quad (20)$$

$$C_{H.S}^2 = K_2 P_{H_2} C_v^2 \quad (21)$$

3.2.3 Persamaan Laju Reaksi Permukaan

$$r_3 = k_3 C_{TMP.S} C_{H.S}^2 - k_{-3} C_{IO.S} C_v^2 \quad (22)$$

$$r_3 = k_3 \left(C_{TMP.S} C_{H.S}^2 - \frac{C_{IO.S} C_v^2}{K_3} \right) \quad (23)$$

Ketika $r_3 = 0$, persamaan laju reaksi berubah menjadi :

$$C_{TMP.S} C_{H.S}^2 = \frac{C_{IO.S} C_v^2}{K_3} \quad (24)$$

$$C_{H.S}^2 = \frac{C_{IO.S} C_v^2}{K_3 C_{TMP.S}} \quad (25)$$

$$C_{IO.S} = \frac{K_3 C_{TMP.S} C_{H.S}^2}{C_v^2} \quad (26)$$

3.2.4 Persamaan Laju Reaksi Desorpsi

$$r_4 = k_4 C_{IO.S} - k_{-4} C_{IO} C_v \quad (27)$$

$$r_4 = k_4 \left(C_{IO.S} - \frac{P_{IO} C_v}{K_4} \right) \quad (28)$$

Ketika $r_4 = 0$, persamaan laju reaksi berubah menjadi :

$$C_{IO.S} = \frac{P_{IO} C_v}{K_4} = P_{IO} C_v K_{IO} \quad (29)$$

$$C_{H.S}^2 = \frac{C_{IO.S} C_v^2}{K_3 C_{TMP.S}} \quad (30)$$

Maka, diperoleh persamaan *active site* sebagai berikut :

$$C_T = C_v + C_{TMP.S} + C_{H.S} + C_{IO.S} \quad (31)$$

3.3 Uji Coba Reaksi Elementer sebagai Tahap Penentu Laju

Untuk menentukan reaksi *Rate Determining Step* yang tepat berdasarkan keempat reaksi elementer diatas, dilakukan suatu uji coba terhadap masing-masing reaksi elementer dengan menjadikannya sebagai TPL, sehingga diperoleh suatu persamaan laju reaksi sebagai berikut :

3.3.1 Adsorpsi Isooktena sebagai TPL

$$r_1 = k_1 \left(P_{TMP-1} C_v - \frac{C_{TMP-1}}{K_1} \right) \quad (32)$$

$$C_v = \frac{C_T}{\left(1 + \sqrt{K_2 P_{H_2}} + \frac{P_{IO}}{K_4} \right)} \quad (33)$$

$$r_1 = k_1 \left(\frac{P_{TMP-1} C_T}{\left(1 + \sqrt{K_2 P_{H_2}} + \frac{P_{IO}}{K_4} \right)} \right) \quad (34)$$

3.3.2 Adsorpsi Hidrogen sebagai TPL

$$r_2 = k_2 \left(P_{H_2} C_v^2 - \frac{C_{H.S}}{K_2} \right) \quad (35)$$

$$C_v = \frac{C_T}{\left(1 + K_1 P_{TMP-1} + \frac{P_{IO}}{K_4} \right)} \quad (36)$$

$$r_2 = k_2 \left(\frac{P_{H_2} C_T^2}{\left(1 + K_1 P_{TMP-1} + \frac{P_{IO}}{K_4} \right)^2} \right) \quad (37)$$

3.3.3 Reaksi Permukaan sebagai TPL

$$r_3 = k_3 \left(C_{TMP.S} C_{H.S}^2 - \frac{C_{IO.S} C_v^2}{K_3} \right) \quad (38)$$

$$C_v = \frac{C_t}{\left(1 + K_1 P_{TMP} + (K_2 P_{H_2})^{1/2} + \frac{P_{IO}}{K_4} \right)} \quad (39)$$

$$r_3 = K \left(\frac{P_{TMP}P_{H_2} - \frac{P_{IO}}{K_D}}{\left(1 + K_1P_{TMP} + (K_2P_{H_2})^{1/2} + \frac{P_{IO}}{K_4}\right)^3} \right) \quad (40)$$

Keterangan :

$$K = k_3 C_t^3 K_1 K_2$$

$$K_D = \frac{1}{K_1 K_2 K_3 K_5}$$

3.3.4 Desorpsi sebagai TPL

$$r_4 = k_4 \left(C_{IO.S} - \frac{P_{IO}}{K_4} \right) \quad (41)$$

$$C_v \quad (42)$$

$$= \frac{C_t}{\left(1 + K_1P_{TMP} + (K_2P_{H_2})^{1/2} + K_1K_2K_3P_{TMP}P_{H_2}\right)} \quad (43)$$

$$r_4 = k \left(\frac{P_{TMP}P_{H_2} - \frac{P_{IO}}{K_D}}{\left(1 + K_1P_{TMP} + (K_2P_{H_2})^{1/2} + K_M P_{TMP}P_{H_2}\right)} \right)$$

Keterangan :

$$k = k_4 C_t K_M$$

$$K_D = \frac{1}{K_M K_5}$$

$$K_M = K_1 K_2 K_3$$

Selain menguji coba keempat persamaan elementer diatas menjadi TPL, penentuan reaksi yang tepat sebagai reaksi TPL juga dilakukan dengan pembuktian dengan melakukan regresi linier menggunakan *software* Polymath.

3.4 Pembuktian Persamaan Laju Reaksi dengan TPL yang Bervariasi

3.4.1 Asumsi TPL adalah Adsorpsi Isooktana

$$r_1 = k \left(\frac{P_{TMP}C_T}{\left(1 + \sqrt{K_2K_{H_2}} + K_{10}P_{10}\right)} \right) \quad (44)$$

Kemudian persamaannya dilinearisasi menjadi:

$$\frac{P_{TMP}}{r_1} = \frac{1}{k} + \frac{K_2}{\sqrt{k}} P_{H_2} + \frac{K_{10}}{k} P_{10} \quad (45)$$

Hasil regresi dari Polymath ini menggambarkan upaya untuk menguji asumsi bahwa adsorpsi i-oktana adalah

tahap penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) dalam reaksi hidrogenasi i-oktana menjadi i-oktana. Model persamaan yang digunakan dalam regresi ini melibatkan tiga parameter utama: konstanta (a_0), koefisien untuk tekanan parsial hidrogen (a_1), dan koefisien untuk tekanan parsial i-oktana (a_2). Tujuannya adalah untuk melihat seberapa besar pengaruh masing-masing variabel terhadap laju reaksi.

Berdasarkan hasil regresi, konstanta a_0 memiliki nilai sebesar 7,42, yang menunjukkan elemen dasar dari laju reaksi yang tidak bergantung pada variabel lainnya. Koefisien a_1 untuk tekanan hidrogen bernilai negatif (-0,26), yang berarti peningkatan tekanan hidrogen justru sedikit mengurangi laju reaksi. Sementara itu, koefisien a_2 untuk tekanan parsial i-oktana bernilai positif (0,88), menunjukkan bahwa peningkatan tekanan i-oktana meningkatkan laju reaksi secara signifikan.

Dari segi statistik, koefisien determinasi (R^2) sebesar 0,576 menunjukkan bahwa model ini hanya menjelaskan sekitar 57,67% dari variabilitas data. Ini berarti bahwa meskipun ada hubungan yang dapat dijelaskan oleh model, masih ada sekitar 42,33% variabilitas yang tidak dijelaskan oleh model ini, sehingga model dianggap kurang memadai. Nilai R^2 *adj* = 0,482, yang lebih rendah dari R^2 , mengonfirmasi bahwa penambahan variabel dalam model ini tidak memperbaiki kecocokan secara signifikan.

Dengan mempertimbangkan angka-angka ini, dapat disimpulkan bahwa asumsi adsorpsi i-oktana sebagai RDS tidak terlalu kuat. Meskipun model menunjukkan bahwa i-oktana memiliki pengaruh positif terhadap laju reaksi, model ini masih tidak cukup untuk sepenuhnya menggambarkan mekanisme reaksi yang sebenarnya. Ini terlihat dari nilai R^2 yang rendah, yang mengindikasikan bahwa ada faktor atau tahap lain yang lebih relevan dalam

menentukan laju keseluruhan reaksi.

3.4.2 Asumsi TPL adalah Adsorpsi Hidrogen

$$r_2 = k \left(\frac{K_{H_2} C_T^2}{(1 + K_1 P_{TMP} + K_{10} P_{10})^2} \right) \quad (46)$$

Kemudian persamaannya dilinearisasi menjadi:

$$\sqrt{\frac{P_{H_2}}{r}} = \frac{1}{\sqrt{k}} + \frac{K_1}{\sqrt{k}} P_{TMP} + \frac{K_{10}}{\sqrt{k}} P_{10} \quad (47)$$

Hasil regresi dari Polymath ini menguji asumsi bahwa adsorpsi hidrogen merupakan tahap penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) dalam reaksi hidrogenasi i-oktena menjadi i-oktana. Model yang digunakan menyertakan konstanta (a_0), serta dua koefisien yang berkaitan dengan tekanan parsial i-oktena (a_1) dan i-oktana (a_2). Tujuan dari analisis ini adalah untuk mengevaluasi sejauh mana tekanan parsial dari kedua zat tersebut mempengaruhi laju reaksi dan apakah adsorpsi hidrogen dapat dianggap sebagai tahap penentu laju.

Hasil regresi menunjukkan bahwa konstanta a_0 memiliki nilai sebesar 90,79, yang mencerminkan laju reaksi dasar tanpa pengaruh dari variabel lainnya. Koefisien a_1 , yang mewakili pengaruh tekanan parsial i-oktena, bernilai negatif (-10,05), yang berarti peningkatan tekanan i-oktena cenderung menurunkan laju reaksi. Di sisi lain, koefisien a_2 , yang terkait dengan tekanan parsial i-oktana, bernilai positif (15,74), menunjukkan bahwa peningkatan tekanan i-oktana sedikit meningkatkan laju reaksi.

Namun, dari segi statistik, hasilnya menunjukkan bahwa model ini memiliki kecocokan yang sangat lemah dengan data eksperimen. Koefisien determinasi (R^2) sebesar 0,26 menunjukkan bahwa model ini hanya dapat menjelaskan sekitar 26,47%

dari variabilitas dalam data. Ini adalah nilai yang sangat rendah, mengindikasikan bahwa sebagian besar variabilitas data tidak dapat dijelaskan oleh model ini. Selain itu, nilai R^2 *adj* yang hanya 0,10 menegaskan bahwa penambahan variabel dalam model ini tidak memberikan kontribusi yang signifikan dalam meningkatkan kecocokan model dengan data.

Selanjutnya, nilai R_{msd} (26,12) yang tinggi menunjukkan bahwa model memiliki tingkat kesalahan yang besar dalam memprediksi laju reaksi, yang mengindikasikan bahwa prediksi model jauh dari hasil eksperimen yang sebenarnya. Variansi yang besar juga menunjukkan adanya penyimpangan yang signifikan dalam data yang tidak dapat dijelaskan oleh model.

Secara keseluruhan, hasil regresi ini menunjukkan bahwa asumsi adsorpsi hidrogen sebagai tahap penentu laju tidak didukung oleh data eksperimen. Nilai statistik yang rendah menunjukkan bahwa model ini tidak mampu menggambarkan mekanisme reaksi yang sebenarnya dengan baik. Dengan demikian, dapat disimpulkan bahwa adsorpsi hidrogen kemungkinan bukanlah tahap yang paling signifikan dalam menentukan laju reaksi, dan tahap lain dalam mekanisme reaksi perlu dipertimbangkan sebagai RDS untuk mendapatkan kecocokan yang lebih baik antara model dan data.

3.4.3 Asumsi TPL adalah Reaksi Permukaan

$$r_3 = k \left(\frac{P_{TMP} P_{H_2}}{(1 + K_1 P_{TMP} \sqrt{K_2 P_{H_2}} + K_{10} P_{10})^3} \right) \quad (48)$$

Kemudian persamaannya dilinearisasi menjadi:

$$\sqrt[3]{\frac{P_{TMP} P_{H_2}}{r_3}} = \frac{1}{\sqrt[3]{k}} + \frac{K_1}{\sqrt[3]{k}} P_{TMP} + \frac{K_2}{\sqrt[3]{k^2}} P_{H_2} + \frac{K_{10}}{\sqrt[3]{k}} P_{10} \quad (49)$$

Hasil regresi dari Polymath ini menguji asumsi bahwa reaksi permukaan adalah tahap penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) dalam reaksi hidrogenasi i-oktena menjadi i-oktana. Model yang digunakan dalam regresi ini melibatkan tiga variabel independen, yaitu tekanan parsial i-oktena, tekanan parsial hidrogen, dan tekanan parsial i-oktana. Tujuan dari model ini adalah untuk mengevaluasi bagaimana ketiga variabel ini mempengaruhi laju reaksi secara keseluruhan dan apakah reaksi permukaan merupakan tahap yang paling lambat, yang menentukan laju reaksi.

Hasil dari regresi menunjukkan bahwa a_0 , yang merupakan konstanta dalam model, memiliki nilai 2,53, menunjukkan bahwa laju reaksi dasar tanpa pengaruh dari variabel lainnya tetap positif. Variabel a_1 , yang mewakili pengaruh tekanan parsial i-oktena, memiliki nilai 0,27, menunjukkan bahwa peningkatan tekanan i-oktena meningkatkan laju reaksi. Variabel a_2 , yang mewakili pengaruh tekanan parsial hidrogen, memiliki nilai yang lebih tinggi, yaitu 0,42, menunjukkan bahwa peningkatan tekanan hidrogen memberikan pengaruh yang signifikan dalam mempercepat reaksi. Sementara itu, a_3 , yang mewakili tekanan parsial i-oktana, juga positif dengan nilai 0,35, menunjukkan bahwa peningkatan konsentrasi i-oktana juga meningkatkan laju reaksi, meskipun pengaruhnya sedikit lebih kecil dibandingkan dengan hidrogen.

Secara statistik, model ini menunjukkan kecocokan yang sangat baik dengan data. Koefisien determinasi (R^2) sebesar 0,993 berarti bahwa model ini mampu menjelaskan 99,32% dari variasi yang ada dalam data eksperimen, yang merupakan indikasi kuat bahwa model ini sangat akurat dalam merepresentasikan data. Selain itu, nilai R^2 *adj* sebesar 0,990 mengindikasikan bahwa penambahan variabel independen dalam model tidak hanya meningkatkan

kecocokan tetapi juga menjadikan model ini lebih kuat. Nilai R_{msd} (*Root Mean Square Deviation*) yang rendah, yaitu 0,03498, menunjukkan bahwa model ini memiliki tingkat kesalahan yang sangat kecil dalam memprediksi laju reaksi, dan variansi yang rendah lebih memperkuat keandalan model.

Berdasarkan hasil ini, dapat disimpulkan bahwa asumsi reaksi permukaan sebagai tahap penentu laju sangat valid dan tepat. Kecocokan yang hampir sempurna dengan data eksperimen menunjukkan bahwa reaksi permukaan, di mana hidrogen teradsorpsi bereaksi dengan i-oktena yang juga teradsorpsi pada katalis, merupakan tahap yang paling lambat dan karenanya menentukan laju keseluruhan dari reaksi hidrogenasi ini. Pengaruh tekanan hidrogen yang lebih besar (nilai a_2 lebih tinggi) juga menunjukkan bahwa keberadaan hidrogen sangat penting dalam mempercepat reaksi pada tahap permukaan ini.

3.4.4 Asumsi TPL adalah Desorpsi Isooktana

$$r_4 = k \left(\frac{P_{TMP} P_{H_2}}{(1 + K_1 P_{TMP} \sqrt{K_2 P_{H_2}} + K_M P_{TMP} P_{H_2})} \right) \quad (50)$$

Kemudian persamaannya dilinearisasi menjadi:

$$\frac{P_{TMP} P_{H_2}}{r_4} = \frac{1}{k} + \frac{K_1}{k} P_{TMP} + \frac{K_2}{\sqrt{k}} P_{H_2} + \frac{K_M}{k} P_{TMP} P_{H_2} \quad (51)$$

Hasil regresi dari Polymath ini mengasumsikan bahwa desorpsi i-oktana merupakan tahap penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) dalam reaksi hidrogenasi i-oktena menjadi i-oktana. Model yang digunakan dalam regresi ini melibatkan dua variabel independen, yaitu tekanan parsial i-oktena (a_1) dan tekanan parsial hidrogen (a_2), sementara konstanta (a_0) digunakan untuk menggambarkan dasar laju reaksi.

Dari hasil regresi, a_0 memiliki nilai sebesar 33,93, yang menunjukkan laju dasar reaksi ketika tidak ada pengaruh dari variabel lainnya. Nilai ini cukup besar, menandakan bahwa tanpa interaksi signifikan dari tekanan parsial reaktan, laju reaksi masih berjalan dengan baik. a_1 , yang mewakili tekanan parsial i-oktena, bernilai 17,11, yang menunjukkan bahwa peningkatan tekanan parsial i-oktena meningkatkan laju reaksi.

Demikian pula, a_2 , yang mewakili tekanan parsial hidrogen, memiliki nilai yang lebih besar, yaitu 35,29, yang menunjukkan bahwa tekanan parsial hidrogen memiliki pengaruh signifikan terhadap peningkatan laju reaksi. Nilai a_2 yang lebih besar dibandingkan a_1 mengindikasikan bahwa hidrogen memainkan peran lebih dominan dalam mempengaruhi laju reaksi ketika diasumsikan bahwa desorpsi i-oktena adalah tahap yang paling lambat.

Namun, dari segi statistik, model ini menunjukkan kecocokan yang cukup moderat dengan data eksperimen. Koefisien determinasi (R^2) sebesar 0,579 menunjukkan bahwa model ini hanya dapat menjelaskan sekitar 57,9% dari variasi dalam data, yang berarti bahwa hampir setengah dari variabilitas data tidak dijelaskan oleh model ini. Nilai R^2 *adj* yang lebih rendah, yaitu 0,485, menunjukkan bahwa penambahan variabel independen tidak banyak memperbaiki kecocokan model dengan data.

Selain itu, nilai R_{msd} yang cukup tinggi, yaitu 24,83, menunjukkan bahwa terdapat kesalahan atau penyimpangan yang cukup besar antara prediksi model dan data eksperimen. Variasi yang besar (9861,209) lebih lanjut menunjukkan bahwa ada variasi yang signifikan dalam data yang tidak dijelaskan dengan baik oleh model ini.

Dari hasil ini, dapat disimpulkan bahwa

asumsi desorpsi i-oktena sebagai tahap penentu laju (RDS) kurang tepat. Meskipun peningkatan tekanan parsial i-oktena dan hidrogen memberikan kontribusi positif terhadap laju reaksi, hasil statistik menunjukkan bahwa model ini tidak memiliki kecocokan yang baik dengan data eksperimen.

Dengan nilai R^2 yang moderat dan variansi yang besar, desorpsi i-oktena kemungkinan bukan tahap paling signifikan dalam menentukan laju keseluruhan reaksi. Oleh karena itu, model ini tidak memberikan dukungan yang kuat untuk asumsi desorpsi i-oktena sebagai RDS, dan tahap lain dalam mekanisme reaksi mungkin lebih relevan.

Dari hasil regresi linear menggunakan *software* Polymath, didapatkan bahwa TPL dari mekanisme reaksi ini adalah Reaksi Permukaan dengan $R^2 = 0.99$ dan nilai variabel-variabel yang positif adalah:

$$A_0 = 2.525607 \pm 0.193038, \text{ maka nilai}$$

$$K = \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 = 0.06207 \text{ mol g}^{-1} \text{ h}^{-1} \text{ atm}^{-2}$$

$$a_1 = 0.2741962 \pm 0.0382608, \text{ maka nilai}$$

$$K_1 = a_1 \times \sqrt[3]{k} = 0.042986 \text{ g}^{1/3} \text{ h}^{1/3} \text{ mol}^{-1/3} \text{ atm}^{-1}$$

$$a_2 = 0.4232267 \pm 0.0382608, \text{ maka nilai}$$

$$K_2 = a_2 \times \sqrt[3]{k^2} = 0.066350 \text{ g}^{2/3} \text{ h}^{2/3} \text{ mol}^{-2/3} \text{ atm}^{-1}$$

$$a_3 = 0.3538493 \pm 0.0360521, \text{ maka nilai}$$

$$K_{10} = a_3 \times \sqrt[3]{k} = 0.14014 \text{ g}^{1/3} \text{ h}^{1/3} \text{ mol}^{-1/3} \text{ atm}^{-1}$$

3.5 Analisis Hasil

Penelitian ini berhasil mengidentifikasi tahap penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) dalam reaksi hidrogenasi i-oktena menjadi i-oktena menggunakan katalis Ni/Al₂O₃. Berdasarkan hasil simulasi menggunakan *software* Polymath, didapatkan bahwa reaksi permukaan merupakan tahapan yang paling lambat dan

menentukan laju keseluruhan reaksi dengan koefisien determinasi sebesar 0,99, yang menunjukkan kesesuaian tinggi antara data eksperimen dan model kinetika yang digunakan.

Sesuai dengan tujuan penelitian, yakni memberikan wawasan mendalam mengenai mekanisme reaksi dan faktor-faktor yang mempengaruhi RDS, dapat dijelaskan bahwa faktor-faktor yang mempengaruhi RDS melibatkan beberapa aspek penting dari reaksi hidrogenasi.

1. Adsorpsi Reaktan di Permukaan Katalis

Salah satu faktor utama yang mempengaruhi RDS adalah adsorpsi reaktan pada permukaan katalis. Pada penelitian ini, i-oktana dan hidrogen teradsorpsi ke situs aktif nikel (Ni) yang didukung oleh alumina (Al_2O_3). Efektivitas adsorpsi dipengaruhi oleh luas permukaan katalis dan distribusi situs aktif. Semakin tinggi kemampuan adsorpsi, semakin banyak reaktan yang dapat berinteraksi pada permukaan katalis, sehingga tahap ini dapat berjalan lebih cepat. Sebaliknya, jika kemampuan adsorpsi rendah, laju keseluruhan reaksi dapat terhambat karena kurangnya reaktan yang tersedia di situs aktif (Veriansyah et al., 2008).

2. Aktivasi Reaktan

Reaktan yang teradsorpsi kemudian diaktivasi melalui interaksi dengan situs aktif katalis. Pada tahap ini, energi aktivasi menjadi faktor penting yang mempengaruhi RDS. Energi aktivasi adalah energi minimum yang dibutuhkan untuk memulai reaksi permukaan. Semakin tinggi energi aktivasi, semakin lambat laju reaksi permukaan karena lebih sedikit molekul yang memiliki energi yang cukup untuk bereaksi pada temperatur reaksi yang telah ditetapkan (Bahar & Elvaswer, 2023). Pada kasus ini, reaksi permukaan menjadi tahap yang paling

lambat karena memerlukan energi aktivasi yang tinggi untuk mengubah i-oktana menjadi i-oktana.

3. Ketersediaan Situs Aktif

Faktor lain yang mempengaruhi RDS adalah jumlah dan ketersediaan situs aktif pada permukaan katalis. Seiring berjalannya reaksi, situs aktif dapat mengalami saturasi oleh molekul reaktan yang teradsorpsi atau produk yang belum terdesorpsi. Ketika situs aktif terbatas, laju reaksi akan melambat karena hanya sebagian kecil reaktan yang dapat berpartisipasi dalam reaksi. Faktor ini sangat berpengaruh dalam mekanisme reaksi hidrogenasi, terutama pada reaksi permukaan yang melibatkan pembentukan dan pemutusan ikatan kimia, seperti yang terjadi pada hidrogenasi i-oktana (Salim et al., 2014).

4. Desorpsi Produk dari Permukaan Katalis

Setelah reaksi permukaan terjadi, produk, yaitu i-oktana, harus terdesorpsi dari permukaan katalis. Desorpsi produk juga merupakan faktor yang mempengaruhi RDS, karena jika produk tetap terikat pada situs aktif, ia akan menghalangi reaktan baru untuk berinteraksi dengan situs tersebut. Oleh karena itu, desorpsi yang efisien diperlukan untuk memastikan ketersediaan situs aktif bagi reaksi selanjutnya. Dalam kasus hidrogenasi ini, desorpsi produk dianggap lebih cepat dibandingkan reaksi permukaan, sehingga tidak menjadi tahap yang menentukan laju (Widodo et al., 2015).

Secara keseluruhan, faktor-faktor di atas bekerja bersama-sama dalam mempengaruhi laju reaksi hidrogenasi. Adsorpsi reaktan yang efisien dan ketersediaan situs aktif yang cukup dapat mempercepat tahap awal reaksi, tetapi energi aktivasi tinggi pada tahap reaksi permukaan menjadikannya sebagai RDS.

Ketika produk reaksi terdesorpsi dengan baik, situs aktif kembali tersedia untuk reaksi berikutnya, tetapi jika desorpsi terhambat, maka proses selanjutnya juga akan melambat.

5. KESIMPULAN

Berdasarkan penelitian yang sudah dilakukan, penelitian ini berhasil mengidentifikasi tahapan penentu laju (*Rate Determining Step*, RDS) dalam reaksi hidrogenasi i-Oktena menjadi i-Oktana dengan menggunakan katalis Ni/Al₂O₃. Berdasarkan analisis kinetika dan pengamatan eksperimen, dapat disimpulkan bahwa reaksi permukaan merupakan tahapan penentu laju dalam proses ini dengan koefisien determinasi 0,99 pada simulasi *software* Polymath. Adanya tahapan adsorpsi reaktan di permukaan katalis, aktivasi reaktan melalui interaksi dengan situs aktif katalis, serta desorpsi produk reaksi dari permukaan katalis, semua menunjukkan bahwa reaksi permukaan memiliki peran dominan dalam menentukan laju keseluruhan reaksi. Penelitian ini juga mengungkap bahwa ketersediaan dan sifat situs aktif pada permukaan katalis Ni/Al₂O₃ menjadi faktor kritis yang mempengaruhi efisiensi hidrogenasi.

6. UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Unit Penelitian dan Pengabdian kepada Masyarakat (P2M) Politeknik STMI Jakarta atas bantuan dana dan dukungannya dalam penelitian ini.

7. DAFTAR PUSTAKA

Bahar, I. A., & Elvaswer, E. (2023). Karakterisasi arus dan tegangan detektor gas hidrogen dari bahan semikonduktor heterokontak TiO₂/ZnO(Mg). *Journal of Physics*, 12(2), 213-219. <https://doi.org/10.25077/jfu.12.2.213-219.2023>

- Budiyanto, E., Yuono, L. D., Bahfie, F., & Sulistiyo, D. (2021). Ekstraksi limonit dengan metode dua tahap reduksi selektif dan magnetic separation dengan variasi waktu tahan dan suhu rendah. *Muhammadiyah University of Metro*, 10(1). <https://doi.org/10.24127/trb.v10i1.1586>.
- Erlita, D., Puspitasari, A., & Pratama, A. R. (2022). Inovasi penjernihan minyak goreng bekas dengan alat purification oil. *Journal of Inovasi Universitas Bina Jaya*, 22(2), 892-892. <https://doi.org/10.33087/jiubj.v22i2.2033>.
- Hemmati, S., Elnegihi, M. M., Lee, C. H., Chong, D. Y. L., Foo, D. C. Y., How, B. S., & Yoo, C. (2020). Synthesis of large-scale bio-hydrogen network using waste gas from landfill and anaerobic digestion: A P-Graph approach. *Processes*, 8(5), 505-505. <https://doi.org/10.3390/pr8050505>.
- Idriss, H., Scott, M., & Subramani, V. (2015). Introduction to hydrogen and its properties. Elsevier BV, 3-19. <https://doi.org/10.1016/b978-1-78242-361-4.00001-7>.
- Iskandar, N., & Pangestu, R. B. (2017). Evaluasi rendahnya maintenance between failure (MTBF) pada pompa vertikal. *Rotasi*, 19(1), 18-18. <https://doi.org/10.14710/rotasi.19.1.18-23>.
- Jinga, L., Popescu-Pelin, G., Socol, G., Mocanu, S., Tudose, M., Culiță, D. C., Kuncser, A., & Ioniță, P. (2021). Chemical degradation of methylene blue dye using TiO₂/Au nanoparticles. *Nanomaterials*, 11(6), 1605-1605. <https://doi.org/10.3390/nano11061605>.
- Pasyah, A. G., Marpaung, M. A., & Fahdiran, R. (2019). Analisis distribusi timbal sebagai emisi gas buang kendaraan bermotor dengan teknik laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS). *Journal of Science and*

- Technology, 7(3), 23-31.
<https://doi.org/10.21009/03.snf2019.02.pa.23>.
- Prasatiawan, H., Kusumaningtyas, R. D., Triwibowo, B., Hartanto, D., Ghifari, M. F. A., & Karimah, S. (2022). Rekayasa proses distilasi ekstraktif pada pembuatan pelarut berbasis hidrokarbon dengan menggunakan entrainer sulfolana. *Intek: Jurnal Teknologi Indonesia*, 7(1), 18-18.
<https://doi.org/10.31942/inteka.v7i1.6032>.
- Pyo, M., Cho, A., Kang, M., Kim, G., & Shin, J. H. (2018). Physicochemical characteristics and ginsenoside content of Korean traditional wine produced by fermentation of Panax ginseng sprouts. *The Korean Society of Food Preservation*, 25(6), 659-667.
<https://doi.org/10.11002/kjfp.2018.25.6.659>.
- Raharjo, S. H., Winaningsih, I., & Widayat, W. (2020). Efisiensi energi dan reduksi harga total produksi hidrogen pada siklus sulfur-iodine seksi III skala pilot menggunakan analisis pinch. *Diponegoro University*, 41(1), 48-54.
<https://doi.org/10.14710/teknik.v41i1.24409>.
- Salim, M. F., Roslan, R., & Ibrahim, M. A. (2014). RDS - A systematic approach towards system thermal hydraulics input code development for a comprehensive deterministic safety analysis. *American Institute of Physics*.
<https://doi.org/10.1063/1.4866104>.
- Susanti, R. F., Veriansyah, B., Kim, J., Kim, J., & Lee, Y. (2010). Continuous supercritical water gasification of isooctane: A promising reactor design. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(5), 1957-1970.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.12.157>.
- Veriansyah, B., Kim, J., Kim, J., & Lee, Y. (2008). Hydrogen production by gasification of isooctane using supercritical water. *International Journal of Hydrogen Energy*, 5(4), 322-333.
<https://doi.org/10.1080/15435070802229084>.
- Widodo, A., Satrijo, D., & Prahasto, T. (2015). Deteksi kerusakan roda gigi dengan analisis sinyal getaran. *Rotasi*, 17(2), 67-75.
<https://doi.org/10.14710/rotasi.17.2.67-75>.
- Wulandari, W. T., Hamdani, D., & Sutarno, S. (2020). Pengembangan LKPD berorientasi REACT strategy pada materi momentum dan impuls. *Journal of Physics Education*, 3(2), 151-162.
<https://doi.org/10.33369/jkf.3.2.151-162>.