

Akurasi Metode Estimasi Properti Kritis Untuk Senyawa Hidrokarbon Pada Minyak Atsiri Bunga Kamboja Putih dan Bunga Cengkeh

Bella Aghezzi, Danny Krisna, Sani, Dwi Hery Astuti.

Program Studi Teknik Kimia, Universitas Pembangunan Nasional "Veteran" Jawa Timur
Jl. Raya Rungkut Madya Gunung Anyar, Surabaya 60294, Indonesia

*Penulis Korespondensi: Dannykrisna16@gmail.com

Received 27 April 2020; Accepted 30 Desember 2020; Available online 31 Mei 2021

Abstrak

Minyak atsiri memiliki komponen penyusun yang sangat banyak dari sebuah bahan. Konstituen penyusun minyak atsiri pada tiap bahan berbeda-beda bergantung pada karakteristik sebuah bahan. Properti komponen murni diperlukan dalam menentukan sifat campuran kimia. Salah satu cara untuk menentukan properti tersebut adalah menggunakan metode estimasi properti. Metode estimasi dalam menentukan properti diantaranya berbasis interaksi grup, kontribusi ikatan, dan kontribusi atom. Beberapa metode yang digunakan untuk melakukan estimasi properties yaitu menggunakan metode Structure (group contribution). Beberapa metode estimasi berdasarkan kontribusi grup yaitu Joback (1984; 1987), Constantinou and Gani (1994), Wilson and Jasperson (1996), and Marrero and Pardillo (1999). Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui metode yang paling sesuai untuk mencari data properties senyawa bunga kamboja putih dan bunga cengkeh serta mengetahui komposisi dan komponen penyusun dari bunga kamboja putih dan bunga cengkeh. proses yang dilakukan adalah proses ekstraksi bunga kamboja putih dan bunga cengkeh dengan menggunakan pelarut n-heksana. dari hasil penelitian mengestimasi properti kritis menunjukkan bahwa metode yang sesuai untuk mengestimasi properti kritis (Tb, Tc, Pc dan Vc) pada komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh adalah metode joback, dengan presentase persen error yaitu 16,91 % untuk Pc, 8,81% untuk Vc, 5,61% untuk Tc dan 9,78% untuk Tb

Kata kunci: estimasi; minyak atsiri; properti kritis

Abstract

Essential oils have very many constituent components of an ingredient. The constituents of essential oil constituents in each ingredient differ depending on the characteristics of an ingredient. Pure component properties are needed in determining the nature of a chemical mixture. One way to determine the property is to use the property estimation method. Estimation methods in determining properties are based on group interactions, bond contributions, and atomic contributions. Some methods used to estimate properties are using the Structure (group contribution) method. Some estimation methods based on group contributions are Joback (1984; 1987), Constantinou and Gani (1994), Wilson and Jasperson (1996), and Marrero and Pardillo (1999). This research was conducted to find out the most suitable method for finding data properties of white frangipani and clove flowers as well as knowing the composition and constituent components of white frangipani flower and clove flower. The process carried out was the process of extracting white frangipani flowers and clove flowers by using solvents -heksana. From the results of the study estimating the critical property shows that the appropriate method for estimating the critical property (Tb, Tc, Pc and Vc) on the component of white frangipani flower and clove flower is a joback method, with the percentage error of 16.91% for Pc, 8.81% for Vc, 5.61% for Tc and 9.78% for Tb

Key words: estimation; essential oils; critical property

PENDAHULUAN

Minyak atsiri merupakan salah satu produk yang dibutuhkan pada berbagai industri

seperti industri kosmetik, obat-obatan, makanan dan minuman. Minyak atsiri adalah campuran dari berbagai persenyawaan organik yang mudah

menguap, mudah larut dalam pelarut organik serta mempunyai aroma yang khas sesuai dengan jenis tanamannya. Dalam minyak atsiri daun pandan wangi dan bunga kamboja cendana ditemukan senyawa penyusun minyak atsiri beserta properti kritis tiap senyawa hidrokarbon berdasarkan data eksperimen dari literatur [1]. Minyak atsiri memiliki komponen penyusun yang sangat banyak dari sebuah bahan. Konstituen penyusun minyak atsiri pada tiap bahan berbeda-beda bergantung pada karakteristik sebuah bahan. Properti komponen murni diperlukan dalam menentukan sifat campuran kimia. Pada titik kritis, properti dari suatu zat disebut dengan properti kritis, yakni suhu kritis [critical temperature (T_{cr})], tekanan kritis [critical pressure (P_{cr})] dan volume jenis kritis [critical specific volume (v_{cr})] [2].

Banyak literatur yang mempublikasikan data – data properties berbagai komponen atau senyawa umum yang digunakan pada berbagai industri kimia. Tidak semua data-data properties suatu komponen dapat ditemukan baik pada literatur maupun software. Permasalahan tersebut dapat diatasi dengan melakukan estimasi (estimation of Properties). Terdapat beberapa metode untuk melakukan estimasi properties yaitu menggunakan Law of Corresponding State dan metode Structure (group contribution) [3]. (Properti kritis seperti temperatur kritis (T_c), tekanan kritis (P_c), dan volume kritis (V_c) merupakan properti yang penting dan sering digunakan dalam korelasi volumetrik, termodinamika, dan transport. Beberapa metode yang digunakan untuk melakukan estimasi properties yaitu menggunakan metode Structure (group contribution). Beberapa metode estimasi berdasarkan kontribusi grup yaitu Joback (1984; 1987). Metode Joback adalah metode kontribusi kelompok. Jenis metode ini menggunakan

informasi struktur dasar molekul kimia seperti daftar kelompok fungsional sederhana, menambahkan parameter ke kelompok-kelompok fungsional, dan menghitung sifat thermophysical dan transportasi sebagai fungsi dari jumlah parameter kelompok [4], Constantinou and Gani (1994), Wilson and Jasperson (1996), and Marrero and Pardillo (1999). Dalam dunia industri, Pemisahan komponen dalam sebuah bahan dipisahkan dengan menggunakan titik kritis dalam kondisi tekanan, suhu dan volume tertentu tergantung property kritis komponen yang dibutuhkan.

Penelitian ini mengembangkan beberapa jenis minyak atsiri untuk dapat ditentukan property kritisnya diantaranya pada bunga kamboja cendana (*Plumeria alba*) dan daun pandan wangi (*Pandanus amaryllifolius roxb.*) yang sebagian besar tersusun dari hidrokarbon alkana, alkena, dan senyawa aromatis. Beberapa senyawa alkana penyusun bunga kamboja cendana antara lain *patchouli alcohol*, *nonadecane*, *9-octadecenal*, *cycloeicosane*, dan *eicosane* [5]. Sedangkan pada daun pandan wangi tersusun atas *nonadecane*, *1-nonadecene*, *1-heptadecene*, *phytol*, dan *tetracosane*. [6]

Senyawa organik yang hanya mengandung atom karbon dan atom hidrogen dikenal dengan nama hidrokarbon. Hidrokarbon dapat dibagi dalam tiga kelas yaitu Hidrokarbon alifitik, Hidrokarbon alisiklik dan Hidrokarbon aromatic [7].

Alkohol dapat membentuk ikatan hidrogen antara molekul-molekulnya, maka titik didih alkohol lebih tinggi daripada titik didih alkil halida atau eter, yang bobot molekulnya sebanding [8].

Tujuan dari penelitian ini yaitu pertama untuk mengetahui metode yang paling sesuai untuk mencari data properties senyawa bunga kamboja putih dan bunga cengkeh. Kedua, untuk mengetahui

komposisi dan komponen penyusun dari bunga kamboja putih dan bunga cengkeh.

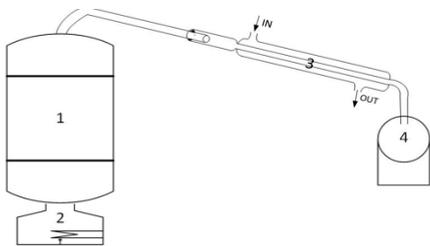
METODE PENELITIAN

Bahan

bahan yang digunakan untuk penelitian ini adalah :

1. Bunga kamboja putih
2. Bunga cengkeh
3. N-heksana
4. Kertas saring

Alat



Keterangan :

1. Vessel
2. Pemanas
3. Kondensor
4. penampung minyak

Prosedur

Proses dilakukan dengan cara ekstraksi bunga kamboja putih dan bunga cengkeh ,yaitu bunga kamboja putih dan bunga cengkeh dipotong kecil-kecil, lalu dikeringkan kemudian diekstraksi menggunakan serangkaian alat penyulingan minyak atsiri dengan pelarut n-heksana. kemudian dilakukan estimasi properti kritis (T_b, T_c, P_c dan V_c) pada berbagai metode yakni Metode Joback, Constantinou & Gani, Wilson & Japerson dan Marerro Pardillo untuk 4 komponen terbesar dalam bunga kamboja putih dan bunga cengkeh . dari hasil properti kritis yang didapat kemudian ditentukan nilai %error pada setiap metode.

Metode Joback

Metode ini dikembangkan oleh Joback pada tahun 1984 dan 1987 yang merupakan evaluasi ulang dari Metode Lydersen pada tahun 1955 yang mengestimasi properti kritis yang berdasarkan kontribusi grup. Joback menambahkan beberapa grup fungsi baru dan menentukan nilai kontribusi grupnya. Berikut persamaan-persamaan untuk properti kritis :

$$T_b = 198 + \sum N_k(tb1)$$

$$T_c = T_b [0.584 + 0.965 \sum N_k(tc_k) - (\sum N_k(tc_k)^2)^{-1}]$$

$$P_c = [0.113 + 0.0032 \times N_{atom} - \sum N_k(pc_k)]^{-2}$$

$$V_c = 17.5 + \sum N_k(vc_k)$$

Dimana tc_k , pc_k , dan vc_k merupakan nilai kontribusi grup untuk masing-masing variabel temperatur, tekanan, dan volume. Nilai kontribusi grup Joback untuk beberapa properti dapat di lihat di Appendix C Tabel 1 Poling.

Metode Constantinou-Gani (CG)

Metode ini diusulkan oleh Constantinou dan Gani pada tahun 1994 untuk mengestimasi properti kritis suatu senyawa berdasarkan kontribusi grup berbasis grup UNIFAC. Dalam metode ini terdapat grup "First order" yang dilambangkan dengan huruf $1k$ dan grup "Second order" yang dilambangkan dengan huruf $2j$. Nilai W diset 0 saat perhitungan pada "First order". Berikut merupakan persamaan untuk estimasi properti kritis :

$$T_b = 204.359 \times \ln \sum N_k(tc1k)$$

$$T_c(K) = 181.128 \ln \left[\sum_k N_k(tc1k) + \sum_j N_j(tc2j) \right]$$

$$P_c(bar) = \left[\sum_k N_k(pc1k) + W \sum_j M_j(pc2j) + 0.10022 \right]^{-2} + 1.3705$$

$$V_c(cm^3 mol^{-1}) = -0.00435$$

$$+ \sum_k N_k(vc1k) + W \sum_j M_j(vc2j)]$$

Dalam persamaan CG ini tidak diperlukan Tbdalam mengestimasi nilaiTc, beberapa nilai kontribusi grup untuk mengestimasi propertikritis pada persamaan 4, 5, dan 6 dapat dilihat di Appendiks Tabel C-2, C-3, dan C-4 Poling.

Metode Wilson-Japerson (WJ)

Metode ini dilaporkan oleh Wilson dan Japerson pada tahun 1996 yaitu penerapan tiga metode untuk estimasi Tc dan Pc pada senyawa organik dan anorganik. Metode pertama adalah Zero order yang menggunakan analisis faktor dengan titik didih, densitas liquid, dan berat molekul sebagai penjelas. Metode yang kedua adalah First order yang menggunakan kontribusi atom dengan titik didih dan jumlah kelompok. Metode ketiga adalah Second order yang juga menggunakan kontribusi grup. Untuk Zero order hasil yang diperoleh kurang akurat sehingga First order dan Second order menjadi metode yang dipilih. Persamaan mengestimasi nilai Tc dan Pc sebagai berikut :

$$Tc = T_b / \left[\frac{0.048271 - 0.019846N_r + \sum_k N_k(tc_k) + \sum_j N_j(tc_j)}{\sum_k N_k(tc_k) + \sum_j N_j(tc_j)} \right]$$

$$P_c(\text{bar}) = 0.0186233 T_c / [-0.96601 + \exp(Y)]$$

$$Y = -0.00922295 - 0.0290403 N_r + 0.041 \left(\sum_k N_k(\Delta p_{ck}) + \sum_j M_j(\Delta p_{cj}) \right)$$

Nr merupakan nomor kelompok, Nk merupakan nomor atom tipe k yaitu kontribusi atom First order, dan Mj adalah nomor grup tipe j dengan kontribusi grup Second order. Nilai kontribusi atom dapat dilihat di tabel 2-3 di buku Poling

Metode Marrero-Pardillo (MP)

Metode ini diusulkan oleh Marrero-Marejón and Pardillo-Fontdevila pada

tahun 1999 yang mendeskripsikan Tc, Pc, dan Vc berdasarkan kontribusi interaksi grup atau disebut juga kontribusi ikatan. Berikut persamaan metode MP :

$$T_b(K) = Mr^{-0.404} \sum_k N_k(tbbk) + 156.00$$

$$Tc = T_b / \left[\frac{0.5851 - 0.9286}{(\sum_k N_k(tc_k)) - (\sum_k N_k(tc_k))^2} \right]$$

$$P_c(\text{bar}) = [(0.1285 - 0.0059 N_{atom}$$

$$- \sum_k N_k(pcbk)]^{-2}$$

$$V_c(\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}) = 25.1 + \sum_k N_k(vcbk)$$

Nilai kontribusi untuk 167 ikatan grup diberikan pada tabel 2-5 pada buku Poling [9].

HASIL DAN PEMBAHASAN

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan didapatkan dari hasil uji GCMS, 4 komponen terbesar bunga kamboja putih dan bunga cengkeh pada tabel berikut ini:

Tabel 1. Hasil analisa komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh.

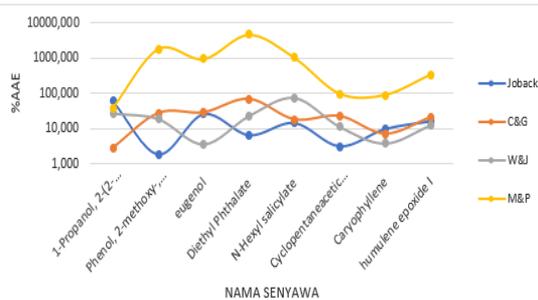
No.	HC ALIFATIK	
	Name	Formula
1	1-Propanol, 2-(2-hydroxypropoxy)	C6H14O3
2	Phenol, 2-methoxy-, acetate	C9H10O3
3	eugenol	C10H12O2
4	Diethyl Phthalate	C12H14O4
5	N-Hexyl salicylate	C13H18O3
6	Cyclopentaneacetic acid, 3-oxo-2-pentyl-, methyl ester	C13H22O3
7	Caryophyllene	C15H24
8	humulene epoxide I	C15H24O

Setelah didapatkan data komponen dari bunga kamboja putih dan bunga cengkeh kemudian dilakukan estimasi properti kritis (Tb, Tc, Pc dan Vc) pada berbagai metode yakni Metode Joback, Constantinou & Gani, Wilson & Japerson dan Marrero Pardillo dan dari hasil yang didapat ditentukan nilai %error pada setiap metode. Pengukuran ketelitian dengan cara rata-rata persentase kesalahan absolut (%AAE) menunjukkan

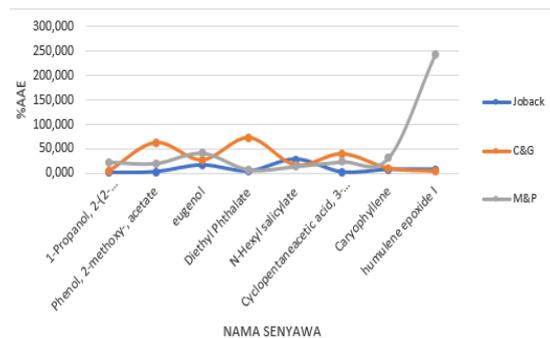
rata-rata kesalahan absolut prakiraan dalam bentuk persentasenya terhadap data aktual.[10]

$$\%AAE = \frac{\sum \frac{|e_i|}{x_i} \times 100}{n}$$

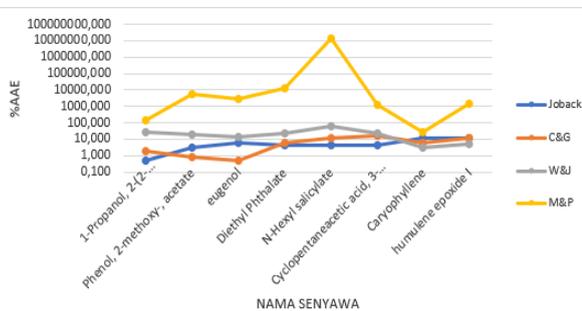
Persen error (%) perhitungan dalam bentuk rata-rata untuk mengestimasi properti kritis dapat dilihat dari gambar berikut ini :



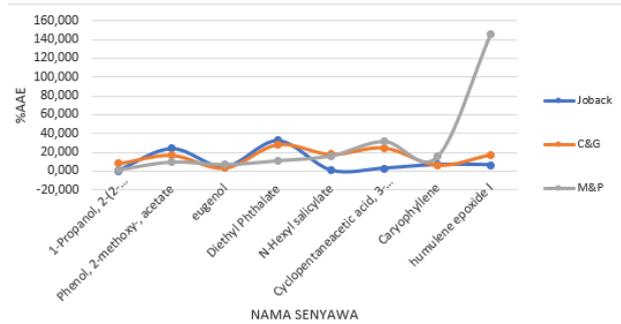
Gambar 1. Perbandingan persen Error pada nilai estimasi tekanan kritis (Pc) untuk setiap metode pada komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh.



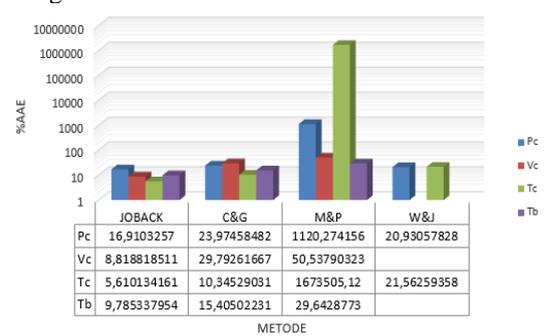
Gambar 2. Perbandingan persen Error pada nilai estimasi volume kritis (Vc) untuk setiap metode pada komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh



Gambar 3. Perbandingan persen Error pada nilai estimasi temperatur kritis (Tc) untuk setiap metode pada komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh.



Gambar 4. Perbandingan persen Error pada nilai estimasi titik didih kritis (Tb) untuk setiap metode pada komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh.



Gambar 5. Perbandingan persen error properti kritis (Tc,Tb,Pc dan Vc) terhadap setiap metode pada komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh.

Dari gambar 5. menunjukkan bahwa metode yang sesuai untuk estimasi properti kritis (Tc,Pc,Tb dan Vc) pada komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh adalah metode Joback dibandingkan dengan metode yang lainnya,dikarenakan dari minimnya rata-rata persen error yang didapatkan pada saat estimasi senyawa hidrokarbon. dengan presentase 16,91 % untuk Pc, 8,81% untuk Vc , 5,61% untuk Tc dan 9,78% untuk Tb. Metode Marrero & Pardillo memiliki banyak kelemahan dalam estimasi ini dikarenakan persen eror yang didapatkan tinggi dibandingkan dengan metode lainnya, %AAE yang didapatkan menunjukkan bahwa konstituen penyusun minyak bunga kamboja dan bunga cengkeh tidak sesuai dengan metode ini .

SIMPULAN

Pada penelitian ini dapat disimpulkan :

1. Metode yang sesuai untuk mengestimasi properti kritis (Tb,Tc,Pc dan Vc) adalah metode joback dengan presentase persen error yaitu 16,91 % untuk Pc, 8,81% untuk Vc , 5,61% untuk Tc dan 9,78% untuk Tb.
2. Metode Marrero & Pardillo memiliki banyak kelemahan dalam estimasi properti kritis (Tb,Tc,Pc dan Vc) yang ada pada komponen bunga kamboja putih dan bunga cengkeh dibandingkan dengan metode lainnya.
3. Senyawa yang mempunyai gugus fungsi berbeda, banyaknya jumlah atom C,H dan O ternyata tidak berpengaruh pada penurunan %AAE untuk estimasi properti kritis (Tb,Tc,Pc dan Vc) pada semua metode

SARAN

Dari hasil penelitian yang telah kami lakukan disarankan agar estimasi Pc, Vc,,Tb dan Tc menggunakan metode joback, untuk estimasi properti kritis pada minyak atsiri bunga kamboja putih dan bunga cengkeh untuk penelitian selanjutnya. Serta diperlukan ketelitian dalam meninjau reid group dan panjang rantai hidrokarbon pada setiap senyawa yang akan diestimasi

DAFTAR PUSTAKA

- [1] chemeo. (2016, 03-04-2019). *Experiment Data*. Available: <https://www.chemeo.com/>
- [2] N. I. Supardi. (2011, 18-03-2018). *Diagram P-v pada Proses Perubahan Fasa Air*. Available: <https://nurulimantmunib.wordpress.com/tag/titik-kritis/>
- [3] A. Halim. (2015, 18-10-2018). *Analisa Estimasi Properti Murni*. Available:

<https://dokumen.tips/documents/makala-hestim-as-i-properties.html>

- [4] J. Gmehling, M. Kleiber, B. Kolbe, and J. Rarey, *Chemical thermodynamics for process simulation*: John Wiley & Sons, 2019.
- [5] N. M. Wartini, G. G. Putra, P. T. Ina, and I. L. Triani, "Komposisi Kimia Minyak Atsiri Bunga Kamboja Cendana (*plumeria alba*) Pada Perlakuan Lama Distilasi," *Media Ilmiah Teknologi Pangan (Scientific Journal of Food Technology)*, 2010.
- [6] N. M. Wartini, G. G. Putra, and P. T. I. S. D. FTP, "Komposisi Kimia Minyak Atsiri Daun Pandan Wangi Hasil Re-Ekstraksi Dengan Etanol," in *Prosiding Seminar Nasional APTA ISBN*, 2014, pp. 978-979.
- [7] S. Riswiyanto, "Kimia Organik," *Penerbit Erlangga, Jakarta*, 2009.
- [8] R. J. Fessenden and J. S. Fessenden, "Kimia organik jilid II," *Jakarta. Penerbit Erlangga*, 1992.
- [9] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, and J. P. O'connell, *The properties of gases and liquids vol. 5*: Mcgraw-hill New York, 2001.
- [10] E. Herjanto, *Manajemen Operasi (Edisi 3)*: Grasindo, 2007.