

# Pemodelan reaktor unggun diam untuk sintesis dimetil eter dari karbon dioksida pada Katalis Cu-Fe-Zr/HZSM-5 = Fixed bed reactor modeling for dimethyl ether synthesis from carbon dioxide with Cu-Fe-Zr/HZSM-5 Catalyst

Naufal Agung Wicaksono, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20519130&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Dimetil eter adalah senyawa organik dengan rumus kimia  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  yang dapat dijadikan bahan bakar alternatif LPG. Tujuan dari penelitian ini adalah mendapatkan model reaktor unggun diam heterogen yang valid untuk sintesis DME dari  $\text{CO}_2$  pada katalis Cu-Fe-Zr/HZSM-5 sehingga diperoleh parameter kinetika yang dipakai untuk merancang reaktor unggun diam skala komersial. Model yang telah dikembangkan disimulasikan menggunakan software COMSOL Multiphysics 5.5. Validasi model dilakukan pada kondisi isothermal sehingga tidak ada neraca energi. Validasi model dilakukan dengan menyamakan konsentrasi luaran reaktor simulasi dan eksperimen dengan mengubah-ubah parameter kinetika. Faktor pra-eksponensial yang diperoleh untuk hidrogenasi  $\text{CO}_2$ , hidrogenasi CO, RWGS, dan dehidrasi metanol masing-masing sebesar  $6,3376 \times 10^3 \text{ mol/kg.s}$ ,  $5,12 \times 10^{-2} \text{ mol/kg.s}$ ,  $1,20863 \times 10^5 \text{ mol/kg.s}$ , dan  $6 \times 10^{29} \text{ mol/kg.s}$  serta energi aktivasi masing-masing sebesar  $1,8919 \times 10^4 \text{ J/mol}$ ,  $0 \text{ J/mol}$ ,  $7,629 \times 10^3 \text{ J/mol}$ , dan  $1 \times 10^5 \text{ J/mol}$  dengan range AARD (average absolute relative deviation) antara 6,3111-13,4582%. Parameter kinetika tersebut dipakai untuk merancang reaktor unggun diam skala komersial untuk target produksi DME sebesar 150.000 ton per tahun dengan memvariasikan suhu, tekanan, GHSV (gas hour space velocity), rasio  $\text{H}_2/\text{CO}_2$ , diameter katalis, dan geometri reaktor sehingga diperoleh volume reaktor terendah. Variasi suhu sebesar 240-280 oC, variasi tekanan sebesar 1-5 MPa, variasi GHSV sebesar 500-2500 mL/g.h, variasi rasio  $\text{H}_2/\text{CO}_2$  sebesar 1:1-7:1, variasi diameter katalis sebesar 1-5 mm, variasi diameter unggun sebesar 5-20 cm, dan variasi panjang unggun sebesar 8-16 m. Hasil yang optimal diperoleh pada suhu 260 oC, tekanan 3 MPa, GHSV 2000 mL/g.h, rasio  $\text{H}_2/\text{CO}_2$  4:1, diameter katalis 2 mm, diameter unggun 10 cm, dan panjang unggun 12 m dengan konsentrasi DME 12,1 mol/m<sup>3</sup>, laju alir massa DME 107,3 kg/d, dan jatuh tekan 0,20384 bar dengan jumlah tube sebanyak 3995 di dalam satu reaktor.

.....Dimethyl ether is an organic compound with the chemical formula  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  which can be used as an alternative fuel for LPG. The objective of this study is to obtain a valid heterogeneous fixed bed reactor model for DME synthesis from  $\text{CO}_2$  on a Cu-Fe-Zr/HZSM-5 catalyst to obtain the kinetic parameters and used to design a commercial scale fixed bed reactor. The developed model was simulated using COMSOL Multiphysics 5.5 software. Model validation was carried out under isothermal conditions so there is no energy balance. Model validation was carried out by fitting the simulation and experimental concentration reactor output by varying the kinetic parameters. The pre-exponential factors obtained for  $\text{CO}_2$  hydrogenation, CO hydrogenation, RWGS, and methanol dehydration were  $6.3376 \times 10^3 \text{ mol/kg.s}$ ,  $5.12 \times 10^{-2} \text{ mol/kg.s}$ ,  $1.20863 \times 10^5 \text{ mol/kg.s}$ , and  $6 \times 10^{29} \text{ mol/kg.s}$  and the activation energies were  $1.8919 \times 10^4 \text{ J/mol}$ ,  $0 \text{ J/mol}$ ,  $7.629 \times 10^3 \text{ J/mol}$ , dan  $1 \times 10^5 \text{ J/mol}$  with the AARD range (average absolute relative deviation) between 6,3111-13,4582%. These kinetic parameters are used to design a commercial scale fixed bed reactor for a DME production target of 150,000 ton per year by varying temperature, pressure, GHSV (gas hourly space velocity),  $\text{H}_2/\text{CO}_2$  ratio, catalyst diameter, and reactor geometry to obtain the lowest

reactor volume. Temperature variation of 240-280 oC, pressure variation of 1-5 MPa, GHSV variation of 500-2500 mL/g.h, H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> ratio variation of 1:1-7:1, catalyst diameter variation of 1-5 mm, reactor diameter variation of 5-20 cm, and reactor length variation of 8-16 m is used. Optimal results were obtained at 260 oC, pressure 3 MPa, GHSV 2000 mL/g.h, H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> ratio 4:1, catalyst diameter 2 mm, reactor diameter 10 cm, and reactor length 12 m with DME concentration of 12.1 mol/m<sup>3</sup>, mass flow rate of 107.3 kg/d, and pressure drop of 0.20384 bar with 3995 tubes in one reactor.