

**MODEL KINETIKA OKSIDASI DAN
PEMBAKARAN TOLUENA PADA RENTANG
TEKANAN, TEMPERATUR DAN RASIO
EKIVALENSI LEBAR**

SKRIPSI

Oleh

SUKIRMAN
0405260279



**DEPARTEMEN TEKNIK KIMIA
FAKULTAS TEKNIK UNIVERSITAS INDONESIA
GANJIL 2007/2008**

**MODEL KINETIKA OKSIDASI DAN
PEMBAKARAN TOLUENA PADA RENTANG
TEKANAN, TEMPERATUR DAN RASIO
EKIVALENSI LEBAR**

SKRIPSI

Oleh

**SUKIRMAN
0405260279**



**SKRIPSI INI DIAJUKAN UNTUK MELENGKAPI SEBAGIAN
PERSYARATAN MENJADI SARJANA TEKNIK**

**DEPARTEMEN TEKNIK KIMIA
FAKULTAS TEKNIK UNIVERSITAS INDONESIA
GANJIL 2007/2008**

PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi dengan judul :

**MODEL KINETIKA OKSIDASI DAN PEMBAKARAN TOLUENA PADA
RENTANG TEKANAN, TEMPERATUR DAN RASIO EKIVALENSI
LEBAR**

yang dibuat untuk melengkapi sebagian persyaratan menjadi Sarjana Teknik pada Program Studi Teknik Kimia Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, sejauh yang saya ketahui bukan merupakan tiruan atau duplikasi dari skripsi yang sudah dipublikasikan dan atau pernah dipakai untuk mendapatkan gelar kesarjanaan di lingkungan Universitas Indonesia maupun di Perguruan Tinggi atau Instansi manapun, kecuali bagian yang sumber informasinya dicantumkan sebagaimana mestinya.

Depok, 10 Januari 2008

Sukirman

NPM 0405260279

PENGESAHAN

Skripsi dengan judul :

**MODEL KINETIKA OKSIDASI DAN PEMBAKARAN TOLUENA PADA
RENTANG TEKANAN, TEMPERATUR DAN RASIO EKIVALENSI
LEBAR**

dibuat untuk melengkapi sebagian persyaratan menjadi Sarjana Teknik pada Program Studi Teknik Kimia Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia. Skripsi ini telah diujikan pada sidang ujian skripsi tanggal 4 Januari 2008 dan dinyatakan memenuhi syarat/sah sebagai skripsi pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia.

Depok, 10 Januari 2008

Dosen Pembimbing

Dr.rer.nat.Ir. Yuswan Muharam, M.T

NIP 132 137 886

UCAPAN TERIMA KASIH

Alhamdulillah, puji syukur terpanjatkan kepada Allah SWT, Rabb semesta alam yang telah memberikan berbagai kenikmatan kepada umat manusia, termasuk penulis sehingga dapat menyelesaikan skripsi ini dengan sebaik-baiknya. Shalawat dan salam semoga tercurahkan kepada Rasulullah SAW, keluarga, sahabat dan para pengikutnya hingga akhir zaman.

Skripsi dengan judul **“Model Kinetika Oksidasi dan Pembakaran Toluena Pada Rentang Tekanan, Temperatur dan Ekuivalensi Lebar”** ini dibuat sebagai syarat yang harus dipenuhi dalam menyelesaikan mata kuliah Seminar di Departemen Teknik Kimia, Fakultas Teknik Kimia Universitas Indonesia.

Selama proses penyusunan Skripsi ini, penulis telah banyak mendapatkan masukan maupun bantuan dari berbagai pihak. Untuk itu, pada kesempatan ini penulis ingin mengucapkan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Bapak Dr. rer. nat. Ir. Yuswan Muharam, M.T atas bimbingan dan ilmu yang bermanfaat bagi penulis.
2. Bapak Prof. Dr. Ir. Widodo Wahyu Purwanto, DEA selaku ketua Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia.
3. Bapak Ir. Sukirno M.Eng selaku pembimbing akademis.
4. Keluarga yang saya kagumi Muhammad Eka D.R.(Bellpur), Muhammad Azhar W.R. (Endhul), dan Dhiana Savitri (Kwek) atas dorongan, semangat dan doa yang tak kenal lelah.
5. Seluruh pengajar dan civitas Teknik Kimia FTUI yang telah memberikan bekal ilmu kepada penulis.
6. Semua pihak lain yang belum disebutkan, baik secara langsung maupun tidak langsung yang telah banyak membantu penulis.

Depok, 10 Januari 2008

(Sukirman)
NPM. 0405260279

Sukirman
NPM 04 05 26 02 79
Departemen Teknik Kimia

Dosen Pembimbing
I. Dr.rar.net. Ir. Yuswan Muharam, M.Eng.

**MODEL KINETIKA OKSIDASI DAN PEMBAKARAN TOLUENA PADA
RENTANG TEKANAN, TEMPERATUR DAN RASIO EKIVALENSI
LEBAR**

ABSTRAK

Suatu mekanisme kinetika kimia terinci untuk pembakaran toluena telah dilakukan dan dievaluasi pada rentang yang lebar dari suatu reaksi pembakaran. Dalam hal ini mencakup beberapa diantaranya adalah diterapkan dalam alat uji *shock tubes*, *perfectly stirred reactor (PSR)* dan *plug flow reactor (PFR)*. Mekanisme reaksi yang dihasilkan dengan menggunakan program aplikasi Chemkin terdiri dari 617 reaksi elementer dan 107 spesies yang mana membutuhkan keahlian yang cukup untuk mengembangkan suatu mekanisme kinetika kimia yang bisa diaplikasikan pada reaksi oksidasi dengan temperatur sedang hingga temperature tinggi. Dekomposisi termal dari toluene dan reaksi reaksi serangan spesies radikal yang mengarah pada terbentuknya spesies teroksigenasi (*oxygenated species*) diberikan perhatian khusus. Model kinetika toluena yang menyeluruh akan mendukung untuk mendapatkan profil konsumsi bahan bakar yang efisien baik itu untuk aplikasi *shock tubes*, *perfectly stirred reactor* maupun *plug flow reactor*.

Penelitian ini menggunakan data sekunder yang dipakai sebagai acuan untuk validasi adalah hasil percobaan yang dilakukan terhadap campuran homogen pada rentang tertentu nisbah kesetaraan (*equivalence ratios*) pada tekanan yang dimampatkan dari 25 sampai 45 bar dan temperature 920 K hingga 1100 K. Data yang dipakai untuk validasi ini adalah data sekunder dari hasil percobaan Davidson [D.F. Davidson, B.M. Gauthier, R.K. Hanson, Proc. Combust. Inst. 30 (2005) 1175–1182] dengan memvariasikan konsentrasi oksigen, sementara konsentrasi toluenanya dijaga tetap untuk mengetahui seberapa jauh pengaruh dari oksigen dalam berkontribusi terhadap pola ignisi. Percobaan tambahan dengan memvariasikan fraksi mol dari bahan bakar pada harga nisbah kesetaraan tertentu menunjukkan bahwa waktu tunda ignisi menjadi lebih pendek dengan makin tingginya konsentrasi bahan bakar. Prakiraan dari berbagai mekanisme kinetika rinci juga diperbandingkan dimana hasilnya menunjukkan belum didapatkannya keakuratan data mekanisme kinetika untuk toluene terhadap data percobaan untuk penentuan waktu tunda ignisi maupun jumlah panas yang dilepaskan. Analisa fluks dilakukan untuk mengidentifikasi arah reaksi yang paling dominan dan reaksi mana yang menunjukkan penyimpangan dari data yang bersumber dari percobaan dan data hasil simulasi.

Kata kunci: Toluena, Otoignisi, Shock Tubes, PSR dan PFR.

Sukirman NPM 04 05 26 02 79 Chemical Engineering Department	Dosen Pembimbing I. Dr.rar.net.Ir. Yuswan Muharam, M.Eng.
TOLUENE OXIDATION AND COMBUSTION KINETIC MODEL IN WIDE RANGES OF PRESSURE, TEMPERATURE AND EQUIVALENCE RATIO	
ABSTRACT <p>A detailed chemical kinetic mechanism for the combustion of toluene has been assembled and investigated for a wide range of combustion regimes. The later includes shock tubes, perfectly stirred reactor (PSR) and Plug Flow Reactor (PFR). The reaction mechanism features 617 elementary reactions and 107 species and represents an attempt to develop a chemical kinetic mechanism applicable to intermediate and high temperature oxidation. Toluene thermal decomposition and radical attack reactions leading to oxygenated species are given a particular attention. The final toluene kinetic model results in excellent fuel consumption profiles in both flame and plug flow reactors and sensible predictions of temporal evolution of hydrogen radical and pyrolysis products in shock tube experiments. Experiments are conducted for homogeneous mixtures over a range of equivalence ratios at compressed pressures from 25 to 45 bar and compressed temperatures from 920 to 1100 K. Experiments varying oxygen concentration while keeping the mole fraction of toluene constant reveal a strong influence of oxygen in promoting ignition. Additional experiments varying fuel mole fraction at a fixed equivalence ratio show that ignition delay becomes shorter with increasing fuel concentration. Moreover, autoignition of benzene shows significantly higher activation energy than that of toluene. In addition, the experimental pressure traces for toluene show behavior of heat release significantly different from the results of Davidson et al. [D.F. Davidson, B.M. Gauthier, R.K. Hanson, Proc. Combust. Inst. 30 (2005) 1175–1182]. Predictability of various detailed kinetic mechanisms is also compared. Results demonstrate that the existing mechanisms for toluene fail to predict the experimental data with respect to ignition delay and heat release. Flux analysis is further conducted to identify the dominant reaction pathways and the reactions responsible for the mismatch of experimental and simulated data.</p>	
Keywords: Toluene; Autoignition; Shock Tubes, PSR and PFR	

DAFTAR ISI

	Halaman
PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI	ii
PENGESAHAN	iii
UCAPAN TERIMA KASIH	iv
ABSTRAK	v
ABSTRACT	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xxi
DAFTAR LAMPIRAN	xxii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 LATAR BELAKANG	1
1.2 RUMUSAN MASALAH	7
1.3 TUJUAN PENELITIAN	8
1.4 RUANG LINGKUP MASALAH	8
1.5 SISTEMATIKA PENULISAN	9
BAB II KINETIKA KIMIA	11
2.1 HUKUM LAJU REAKSI GLOBAL	11
2.2 REAKSI ELEMENTER	13
2.2.1 Hukum Aksi Massa	13
2.2.2 Tipe Reaksi Elementer	14
2.2.3 Reaksi ke Kanan dan ke Kiri	15
2.2 KETERGANTUNGAN KOEFISIEN LAJU REAKSI TERHADAP TEMPERATUR	15
2.4 KETERGANTUNGAN KOEFISIEN LAJU REAKSI TERHADAP TEKANAN	16
2.5 TERMODINAMIKA DAN KINETIKA	19
2.6 MEKANISME REAKSI	21
2.6.1 Reaksi Rantai	21
2.6.2 Analisis Mekanisme Reaksi	22
2.6.2.1 Analisis sensitivitas	22
2.6.2.2 Analisis aliran reaksi	23

2.7 TAHAPAN REAKSI PEMBAKARAN TOLUENA	24
2.7.1 Reaksi H ₂ /O ₂	25
2.7.2 Reaksi C ₁ -C ₄	25
2.7.3 Reaksi C ₅ dan C ₆	25
2.7.4 Reaksi Radikal Penil	26
2.7.5 Reaksi Radikal Penoksi	27
2.7.6 Reaksi Radikal Penol	28
2.7.7 Reaksi-reaksi Benzokinon	28
2.7.8 Reaksi-reaksi Radikal Siklopentadienil dan Siklopentadiene	28
2.7.9 Reaksi Toluene	30
2.7.10 Reaksi Radikal Benzyl	31
2.7.11 Reaksi-reaksi Benzaldehid	32
2.7.12 Pertumbuhan Massa Molekuler	32
BAB III KARAKTERISTIK OKSIDASI DAN PEMBAKARAN	34
3.1 OTOIGNISI : BATAS IGNISI	36
3.2 <i>IGNITION DELAY TIME</i> (WAKTU PENUNDAAN IGNISI)	39
3.3 PERALATAN MODEL PEMBAKARAN	40
3.3.1 <i>Shock Tube</i>	40
3.3.2 <i>Plug Flow Reactor (PFR)</i>	43
3.3.3 <i>Perfectly Stirred Reactor (PSR)</i>	44
3.3 <i>KNOCK</i> PADA MESIN	45
3.3.1 Oksidasi pada Temperatur Tinggi	45
3.3.2 Oksidasi pada Temperatur Rendah	46
3.3.3 Kerusakan oleh <i>Knock</i>	48
BAB IV METODOLOGI PENELITIAN	49
4.1 RANCANGAN PENELITIAN	49
4.2 RINCIAN KEGIATAN PENELITIAN	51
4.2.1 Investigasi Reaksi Elementer, Data Kinetika Terkait dan Data Termodinamika Spesi yang Terlibat Untuk Sistem Oksidasi dan Pembakaran Etanol	51
4.2.2 Mengembangkan Model Kinetika	56
4.2.3 Validasi Model	58
4.2.4 Analisis	58
4.2.4.1 <i>Analisis sensitivitas</i>	58
4.2.4.2 <i>Analisis aliran reaksi</i>	60

4.2.5 Simulasi	60
4.2.6 Persamaan-persamaan Untuk Perhitungan Numeris (<i>Software</i>).	63
4.2.6.1 <i>Prosedur Perhitungan Numeris</i>	63
4.2.6.1.1 <i>Model Reaktor Teraduk Sempurna (Perfectly Stirred Reactor, PSR)</i>	63
4.2.6.1.2 <i>Reaktor Aliran Turbulen</i>	66
BAB V VALIDASI MEKANISME	67
5.1 <i>SHOCK TUBE</i>	67
5.3 <i>PLUG FLOW REACTOR</i>	72
BAB VI ANALISIS MEKANISME	81
6.1 ANALISIS SENSITIVITAS	81
6.2 ANALISIS ALIRAN REAKSI	84
6.2.1 Kontribusi Reaksi Terhadap Konsumsi Toluena dan Pembentukan Intermediet	84
6.2.1.1 <i>Jet stirred reactor</i>	84
6.2.2 Kontribusi reaksi pembakaran toluena terhadap beberapa produk reaksi.	88
6.2.2.1 <i>Jet stirred reactor</i>	88
BAB VII SIMULASI	92
7.1 <i>SHOCK TUBE</i>	94
7.1.1 Variasi Tekanan	94
7.1.2 Variasi Rasio Ekivalensi	97
7.2 <i>PERFECTLY STIRRED REACTOR (PSR)</i>	97
7.2.1 Variasi Tekanan	97
7.2.2 Variasi Temperatur	101
7.2.3 Variasi Rasio Ekivalensi dan Temperature	106
7.3 <i>PLUG FLOW REACTOR (PFR)</i>	109
7.3.1 Variasi Tekanan	109
7.3.3 Variasi Rasio Ekivalensi dan Temperatur	118
BAB VIII KESIMPULAN	126
DAFTAR ACUAN	128
DAFTAR PUSTAKA	130
LAMPIRAN	131

DAFTAR GAMBAR

		Halaman
Gambar 1.1	Perbandingan system pembakaran beberapa <i>internal combustion engine</i> .	1
Gambar 1.2	Penentuan waktu ignisi berdasarkan perubahan konsentrasi radikal OH selama reaksi pembakaran	5
Gambar 1.3	Distribusi jumlah senyawa hidrokarbon yang terkandung dalam gasolin	6
Gambar 2.1	Perubahan konsentrasi terhadap waktu pada reaksi orde pertama dan kedua	13
Gambar 2.2	Kurva <i>fall-off</i> untuk reaksi unimolekular $C_2H_6 \rightarrow \dot{C}H_3 + \dot{C}H_3$	18
Gambar 2.3	Pola sebaran spesi pada reaksi pembakaran toluena	24
Gambar 3.1	Profil pembangkitan dan penyerapan panas dalam suatu reaksi kimia	35
Gambar 3.2	Batas ignisi pada sistem hidrogen-oksigen	36
Gambar 3.3	Batas ignisi untuk hidrokarbon	38
Gambar 3.4	<i>Ignition delay time</i> terukur dari beberapa peneliti pada campuran hidrokarbon-udara	40
Gambar 3.5	Peralatan <i>shock tube</i>	41
Gambar 3.6	Perilaku waktu eksplosi termal (kiri) dan eksplosi percabangan rantai (kanan) dalam suatu sistem adiabatik	42
Gambar 3.7	Skema <i>plug flow reactor</i>	44
Gambar 3.8	Otoignisi pada siklus mesin yang mengalami <i>knock</i> dan tidak mengalami <i>knock</i>	46
Gambar 3.9	Abstraksi atom hidrogen internal pada radikal heptil peroksi melalui struktur intermediet cincin 6-	47
Gambar 3.10	Pembentukan <i>hot-spots</i> di <i>end-gas</i> pada mesin otto	48
Gambar 4.1	Skema Penelitian	50
Gambar 4.2	Format penulisan data kinetika	54
Gambar 4.3	Format penulisan data termodinamika	55
Gambar 4.4	Format penulisan masukan aplikasi SENKIN	57
Gambar 4.5	Format penulisan masukan aplikasi AURORA	57
Gambar 4.6	Koefisien sensitivitas campuran toluena/udara dalam <i>shock tube</i> 1.0 bar dan temperatur awal 1045 K	59
Gambar 4.7	Skematik dari <i>stirred reactor PSR</i>	64
Gambar 5.1	Profil temperatur untuk <i>ignition delay time</i> di <i>shock tube</i> pada kondisi P= 45 bar T = 1051 K dan $\phi = 1.0$	68

Gambar 5.2	Perbandingan antara data penelitian <i>ignition delay</i> yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 8,65% O ₂ , dan 90,38% Ar, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan P = 45 bar.	69
Gambar 5.3	Perbandingan antara data penelitian <i>ignition delay</i> yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 11,54% O ₂ , dan 87,49% Ar, rasioekivalensi (ϕ) = 0,75 dan P = 45 bar.	69
Gambar 5.4	Perbandingan antara data penelitian <i>ignition delay</i> yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 17,54% O ₂ , dan 81,72% Ar, rasioekivalensi (ϕ) = 0,5 dan P = 45 bar.	70
Gambar 5.5	Perbandingan antara data penelitian <i>ignition delay</i> yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 8,65% O ₂ , dan 90,38% Ar, rasioekivalensi (ϕ) = 1,0 dan P = 25 bar.	70
Gambar 5.6	Perbandingan antara data penelitian <i>ignition delay</i> yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 17,54% O ₂ , dan 81,72% Ar, rasioekivalensi (ϕ) = 0,5 dan P = 25 bar.	71
Gambar 5.7	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C ₅ H ₆ CH ₃ (garis). Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 2,14% O ₂ dan 97,07% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1190 K.	74
Gambar 5.8	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (titik) pada $\phi = 1,4$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C ₅ H ₆ CH ₃ (garis). Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 0,964% O ₂ dan 98,886% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1190 K.	74

Gambar 5.9	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (garis) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies CO (garis). Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 2,14% O ₂ dan 97,07% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1200 K.	75
Gambar 5.10	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (titik) pada $\phi = 1,40$ dengan hasil perhitungan untuk spesies CO (garis). Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 0,964% O ₂ dan 98,8867% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1190 K.	75
Gambar 5.11	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C ₂ H ₂ (garis). Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 2,14% O ₂ dan 97,07% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1190 K.	76
Gambar 5.12	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (titik) pada $\phi = 1,40$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C ₂ H ₂ (garis). Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 0,964% O ₂ dan 98,8867% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1190 K.	76
Gambar 5.13	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C ₂ H ₄ (garis). Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 2,14% O ₂ dan 97,07% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1190	77
Gambar 5.14	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (titik) pada $\phi = 1,40$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C ₂ H ₄ (garis). Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 0,964% O ₂ dan 98,8867% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1190 K.	77
Gambar 5.15	Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer ^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C ₂ H ₄ (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% C ₆ H ₅ CH ₃ , 2,14% O ₂ dan 97,07% Ar, P = 1 atm dan T _{in} = 1200 K.	78

- Gambar 5.16** Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,4$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_2H_4 (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,886% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K. 78
- Gambar 5.17** Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies CH_4 (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 2,14% O_2 dan 97,07% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K. 79
- Gambar 5.18** Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,4$ dengan hasil perhitungan untuk spesies CH_4 (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,886% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K. 79
- Gambar 5.19** Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_6H_5CHO (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 2,14% O_2 dan 97,77% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1200$ K. 80
- Gambar 5.20** Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,4$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_6H_5CHO (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,886% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K. 80

Gambar 6.1	Analisis sensitivitas OH dari beberapa reaksi penting untuk <i>ignition delay</i> pada campuran <i>lean</i> dan <i>rich fuel</i> , berdasarkan kondisi penelitian Brezinsky dan Dryer pada <i>shock tube</i> . P = 1 bar, T = 1090, $\phi = 0,5, 1,0$ dan $1,5$ (0,1557% C ₆ H ₅ CH ₃ , 1,844% O ₂ dan 98,0% N ₂).	82
Gambar 6.2	Analisis sensitivitas OH dari beberapa reaksi penting untuk reactor alir pada campuran <i>lean</i> dan <i>rich fuel</i> , berdasarkan kondisi penelitian Brezinsky dan Dryer pada <i>shock tube</i> . P = 1 bar, T = 11730, $\phi = 0,76$ (0,1557% C ₆ H ₅ CH ₃ , 1,844% O ₂ dan 98,0% N ₂) dan <i>residence time</i> 135 milidetik.	83
Gambar 6.3	Tahapan pembentukan spesi-spesi C ₆ H ₆ , OC ₆ H ₄ CH ₃ , C ₆ H ₅ CH ₂ , HOC ₆ H ₄ CH ₃ dan CH ₂ O pada <i>jet stirred reactor</i> , pada P = 45 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan T = 1045 K.	88
Gambar 6.4	Tahapan pembentukan spesi-spesi C ₆ H ₅ CO dan CO pada <i>jet stirred reactor</i> , pada P = 45 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan T = 1045 K.	88
Gambar 6.5	Tahapan pembentukan spesi-spesi C ₆ H ₅ OH, CO, C ₂ H ₂ dan CH ₂ CO pada <i>jet stirred reactor</i> , pada P = 45 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan T = 1045 K.	89
Gambar 6.6	Tahapan pembentukan spesi-spesi C ₅ H ₆ dan C ₅ H ₄ O pada <i>jet stirred reactor</i> , pada P = 45 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan T = 1045 K.	89
Gambar 6.7	Tahapan pembentukan spesi-spesi CO dan CHO pada <i>jet stirred reactor</i> , pada P = 45 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan T = 1045 K.	89
Gambar 6.8	Tahapan pembentukan spesi-spesi C ₆ H ₆ , OC ₆ H ₄ CH ₃ , C ₆ H ₅ CH ₂ , HOC ₆ H ₄ CH ₃ dan CH ₂ O pada <i>jet stirred reactor</i> , pada P = 25 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan T = 1045 K.	90
Gambar 6.9	Tahapan pembentukan spesi-spesi C ₆ H ₅ CO dan CO pada <i>jet stirred reactor</i> , pada P = 25 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan T = 1045 K.	90

Gambar 6.10	Tahapan pembentukan spesi-spesi C_6H_5OH , CO , C_2H_2 dan CH_2CO pada <i>jet stirred reactor</i> , pada $P = 25$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.	90
Gambar 6.11	Tahapan pembentukan spesi-spesi CO dan CHO <i>jet stirred reactor</i> , pada $P = 25$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.	91
Gambar 7.1	Profil temperatur ignisi pada kondisi $T_{awal} = 1051$ K, $P = 45$ bar dan $\phi = 1.0$	93
Gambar 7.2.	Profil temperatur ignisi pada kondisi $T_{awal} = 1051$ K, $P = 25$ bar dan $\phi = 1.0$	93
Gambar 7.3.	Profil temperatur ignisi pada kondisi $T_{awal} = 1051$ K, $P = 45$ bar dan $\phi = 0,5$	94
Gambar 7.4	Perbandingan <i>ignition delay time</i> pada tekanan 45 dan 25 atm. Rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 (0,962% $C_6H_5CH_3$, 8,65% O_2 dan 90,38% Ar)	94
Gambar 7.5	Perbandingan <i>ignition delay time</i> pada kondisi 45 bar untuk $\phi=0,5$, 0,75 dan 1,0 dengan konsentrasi 0,962% $C_6H_5CH_3$.	95
Gambar 7.6	Profil konsentrasi reaktan utama pada kondisi 45 bar dan temperatur 1051 K, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0.	96
Gambar 7.7	Profil konsentrasi reaktan utama pada kondisi 45 bar dan temperatur 1051 K rasio ekivalensi (ϕ) = 0,5.	96
Gambar 7.8	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk O_2 dan $C_6H_5CH_3$. Kondisi penelitian: $T=1200$ K dan $\phi=1,0$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)	98
Gambar 7.9	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk O_2 dan $C_6H_5CH_3$. Kondisi penelitian: $T=1200$ K dan $\phi=1,0$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)	98
Gambar 7.10	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H, H_2O dan OH. Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 1,0$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)	99
Gambar 7.11	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H, H_2O dan OH. Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 1,0$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)	99

Gambar 7.12	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H ₂ O, CO dan CO ₂ . Kondisi penelitian: T=1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	100
Gambar 7.13	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H ₂ O, CO dan CO ₂ . Kondisi penelitian: T=1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	100
Gambar 7.14	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk CH ₄ , C ₂ H ₄ dan C ₂ H ₆ dan C ₆ H ₆ . Kondisi penelitian: T=1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	101
Gambar 7.15	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk CH ₄ , C ₂ H ₄ dan C ₂ H ₆ dan C ₆ H ₆ . Kondisi penelitian: T=1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	101
Gambar 7.16	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk O ₂ dan C ₆ H ₅ CH ₃ . Kondisi penelitian: T _{awal} =1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar).	102
Gambar 7.17	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk O ₂ dan C ₆ H ₅ CH ₃ . Kondisi penelitian: T _{awal} =1092 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	102
Gambar 7.18	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H, H ₂ O dan OH. Kondisi penelitian : T _{awal} = 1200 K dan $\phi = 1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	103
Gambar 7.19	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H, H ₂ O dan OH. Kondisi penelitian : T _{awal} = 1092 K dan $\phi = 1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	103

Gambar 7.20	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H ₂ O, CO dan CO ₂ . Kondisi penelitian: T _{awal} =1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	104
Gambar 7.21	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H ₂ O, CO dan CO ₂ . Kondisi penelitian: T _{awal} =1092 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	105
Gambar 7.22	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk CH ₄ , C ₂ H ₄ dan C ₂ H ₆ dan C ₆ H ₆ . Kondisi penelitian: T _{awal} =1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	105
Gambar 7.23	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk CH ₄ , C ₂ H ₄ dan C ₂ H ₆ dan C ₆ H ₆ . Kondisi penelitian: T _{awal} =1092 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 8,64% O ₂ dan 90,38% Ar)	106
Gambar 7.24	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H, H ₂ O dan OH. Kondisi penelitian : T = 1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 17,30% O ₂ dan 81,72% Ar)	106
Gambar 7.25	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H, H ₂ O dan OH. Kondisi penelitian : T = 1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 17,30% O ₂ dan 81,72% Ar)	107
Gambar 7.26	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H ₂ O, CO dan CO ₂ . Kondisi penelitian: T=1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 17,30% O ₂ dan 81,72% Ar)	107
Gambar 7.27	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk CH ₄ , C ₂ H ₄ dan C ₂ H ₆ dan C ₆ H ₆ . Kondisi penelitian: T _{awal} =1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C ₆ H ₅ OCH ₃ , 17,30% O ₂ dan 81,72% Ar)	108

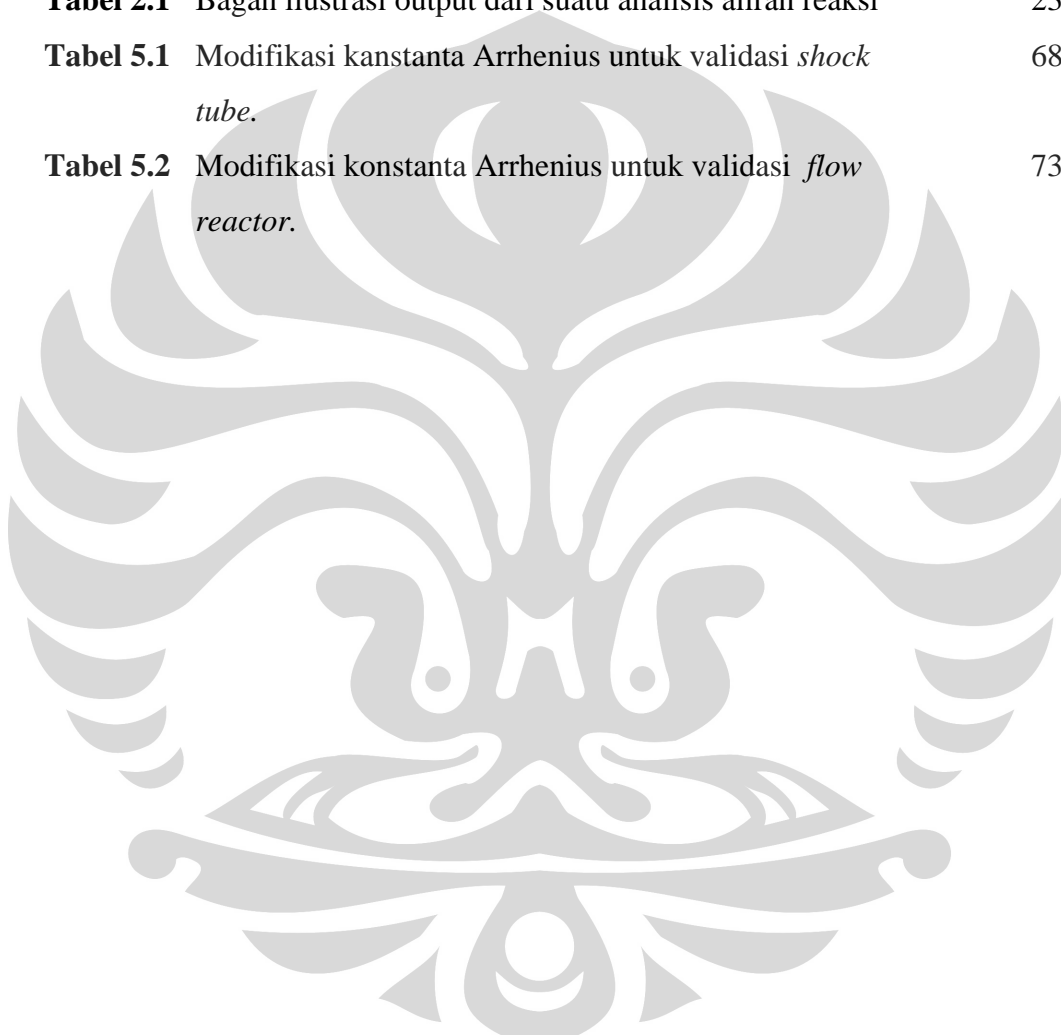
Gambar 7.28	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk O_2 dan $C_6H_5CH_3$. Kondisi penelitian: $T_{awal}=1092$ K dan $\phi = 0,5$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 17,30% O_2 dan 81,72% Ar)	108
Gambar 7.29	Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk O_2 dan $C_6H_5CH_3$. Kondisi penelitian: $T_{awal}=1092$ K dan $\phi = 1,0$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 17,30% O_2 dan 81,72% Ar)	109
Gambar 7.30	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk $C_6H_5CH_3$ dan O_2 . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,29% Ar)	109
Gambar 7.31	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm untuk $C_6H_5CH_3$ dan O_2 . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,29% Ar)	110
Gambar 7.32	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk H, O, OH, HO_2 . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,29% Ar)	110
Gambar 7.33	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm untuk H, O, OH, HO_2 . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,29% Ar)	111
Gambar 7.34	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk CO_2 , CO, H_2O . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,29% Ar)	111
Gambar 7.35	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm untuk CO_2 , CO, H_2O . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,29% Ar)	112
Gambar 7.36	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 dan C_2H_6 . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,29% Ar)	112

Gambar 7.37	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm untuk CH ₄ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₄ dan C ₂ H ₆ . Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar)	113
Gambar 7.38	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk C ₆ H ₆ dan C ₆ H ₅ OH . Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar)	113
Gambar 7.39	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm untuk C ₆ H ₆ dan C ₆ H ₅ OH . Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar)	114
Gambar 7.40	Perbandingan profil temperatur reaksi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm .Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar)	114
Gambar 7.41	Perbandingan profil temperatur reaksi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm .Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar)	115
Gambar 7.42	Perbandingan profil temperatur reaksi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar)	115
Gambar 7.43	Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar).	116
Gambar 7.44	Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar).	116
Gambar 7.45	Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar).	117
Gambar 7.46	Perbandingan profil temperatur ignisi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm .Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar).	117

Gambar 7.47	Perbandingan profil temperatur rignisi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 13,7% O ₂ dan 85,29% Ar).	118
Gambar 7.48	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk H, O, OH, HO ₂ . Kondisi penelitian : T = 1190 K dan $\phi = 1,4$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 6,184% O ₂ dan 92,85% Ar)	119
Gambar 7.49	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk H, O, OH dan HO ₂ . Kondisi penelitian : T = 1190 K dan $\phi = 1,4$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 6,184% O ₂ dan 92,85% Ar)	119
Gambar 7.50	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk CH ₄ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₄ dan C ₂ H ₆ . Kondisi penelitian : T = 1190 K dan $\phi = 1,4$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 6,184% O ₂ dan 92,85% Ar)	120
Gambar 7.51	Perbandingan profil konsentrasi pada spesi <i>flow reactor</i> pada kondisi 1 atm untuk C ₆ H ₆ , C ₆ H ₅ CH dan C ₆ H ₅ CHO. Kondisi penelitian oleh Brezinsky dan Dryer: T = 1190 K dan $\phi = 1,4$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 6,184% O ₂ dan 92,85% Ar)	120
Gambar 7.52	Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm . Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1190 K dan $\phi = 1,43$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 6,18% O ₂ dan 92,85% Ar).	121
Gambar 7.53	Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1190 K dan $\phi = 1,43$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 6,18% O ₂ dan 92,85% Ar).	121
Gambar 7.54	Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm . Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1190 K dan $\phi = 1,43$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 6,18% O ₂ dan 92,85% Ar)	122
Gambar 7.55	Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada <i>flow reactor</i> pada kondisi 2 atm . Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1190 K dan $\phi = 1,43$ (0,962% C ₆ H ₅ CH ₃ , 6,18% O ₂ dan 92,85% Ar)	123
Gambar 7.56	Profil konsentrasi spesi H ₂ O, CO dan CO ₂ O dan CO ₂ untuk pembakaran sempurna.	123
Gambar 7.57	Perbandingan profil emisi CO pada PSR <i>reactor</i> pada kondisi 25 dan 45 atm dan $\phi = 0,5, 1,0$ dan 1.5.	124
Gambar 7.58	Perbandingan profil emisi CO pada <i>Plug Flow reactor</i> pada kondisi 25 dan 45 bar, $\phi = 0,5, 1,0$ dan 1.5.	125

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 1.1 Pengaruh konsentrasi toluene terhadap nilai oktan	7
Tabel 2.1 Bagan ilustrasi output dari suatu analisis aliran reaksi	23
Tabel 5.1 Modifikasi konstanta Arrhenius untuk validasi <i>shock tube</i> .	68
Tabel 5.2 Modifikasi konstanta Arrhenius untuk validasi <i>flow reactor</i> .	73



DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1 Data Perbandingan Waktu Ignisi Untuk Eksperimen dan Simulasi	131
Lampiran 2 Koefisien Laju Mekanisme Reaksi Oksidasi dan Pembakaran Toluena	131
Lampiran 3 Data Termodinamika Oksidasi dan Pembakaran Toluena	146
Lampiran 4 Cuplikan Output Program Perhitungan <i>Ignition Delay Time</i>	151
Lampiran 5 Cuplikan Output Program Perhitungan Konsentrasi Spesi Kondisi tunak Pada Reactor PSR.	152
Lampiran 6 Cuplikan Output Program <i>Plug Flow Reactor</i>	156

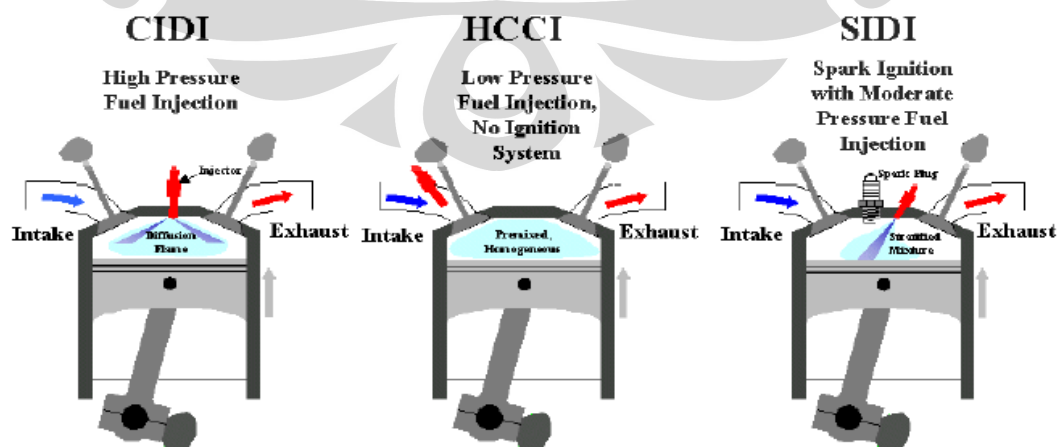
BAB I

PENDAHULUAN

1.1 LATAR BELAKANG

Senyawa aromatik dalam proses pembakaran banyak memiliki sifat-sifat diinginkan dalam hal tingkat kandungan energi dan rating knock yang tinggi. Hal ini sudah terbukti dalam penggunaannya, dimana penambahan senyawa aromatik kedalam gasoline akan meningkatkan angka oktan (octane number) bahan bakar tersebut. Dalam hal ini senyawa toluena (toluene) dan xilena (xylene) merupakan komponen-komponen penting dari bahan bakar bensin dan bahan bakar pesawat komersial.

Semua bahan bakar konvensional apakah itu dalam bentuk padatan, cair ataupun gas, pada dasarnya terdiri dari komponen utama berupa karbon dan atau hidrogen yang akan bereaksi secara beragam dengan oksigen dalam udara untuk membentuk karbondioksida, karbon monoksida dan uap air. Energi panas yang dilepaskan dari reaksi pembakaran dapat digunakan untuk pemanasan, pembangkitan steam tekanan tinggi atau dapat digunakan langsung sebagai sumber tenaga untuk menggerakkan mesin atau turbin gas, dan beragam kegunaan yang lainnya. Contoh sistem pembakaran yang diaplikasikan untuk menggerakkan mesin sebagaimana ditunjukkan pada Gambar 1.1.



Gambar 1.1 Perbandingan system pembakaran beberapa *internal combustion engine*. [1]

Untuk bisa berlangsungnya reaksi pembakaran terhadap segala macam bahan bakar digunakan pengoksidasi umum berupa udara yang untuk kemudahan ditentukan sebagai 21% oksigen dan 79% nitrogen dengan basis volume. Dengan kadar tersebut, dalam perhitungan ditentukan bahwa untuk setiap satu mol oksigen akan disertai dengan 79/21 (=3,76) mol nitrogen. Persamaan stoikiometri untuk reaksi pembakaran karbon oleh udara dituliskan sebagai berikut:



Jumlah minimum udara yang diperlukan untuk berlangsungnya reaksi pembakaran sempurna yang dikenal sebagai "*theoretical air*". Namun pada prakteknya hal ini aka sulit, sehingga hampir pada kebanyakan kasus selalu diterapkan *excess air* yang biasanya disuplai dengan besaran 10-20 % untuk boiler berbahan bakar batubara dan sekitar 5% untuk yang berbahan bakar gas alam. Bahkan dalam hal penggunaan untuk *internal combustion engines* termasuk turbin gas digunakan hingga 400% dari kebutuhan teoritis. Campuran kaya bahan bakar (*fuel rich*) dimana mengandung lebih sedikit dari kebutuhan stoikiometri akan menghasilkan suatu pembakaran tidak sempurna dimana dalam emisinya akan terkandung banyak karbon monoksida dan juga akan ada kerugian energi panas.

Berkaitan dengan masa krisis energi saat ini, terutama dengan melambungnya harga minyak mentah, perhatian untuk penggunaan yang efisien dari bahan bakar sangat ditekankan. Perhatian lebih lanjut untuk emisi gas hidrokarbon dan logam dari buangan membuang hasil pembakaran kendaraan, terutama berasal dari bahan pencegah *knock* pada mesin yaitu timbal tetraetil (*tetraethyllead, TEL*). Tuntutan untuk mengurangi kandungan senyawa ini memacu industri pengilangan minyak bumi untuk bisa kembali memperoleh bilangan oktan yang lebih tinggi. Salah satu strategi yang diterapkannya solusi *reforming* parsial dari reformat minyak menjadi senyawaan aromatik. Saat ini bensin tak bertimbal mengandung 5 – 60 % berat senyawaan aromatik dengan proporsi paling banyak berupa toluene dan benzene. Pada sisi lain, senyawa etena (*ethyne*) dan benzena merupakan penyumbang terbesar dari terbentuknya jelaga (*soot precursor*) dalam proses pembakaran senyawa hidrokarbon. Spesi produk antara (*intermediate*) pada proses pembentukan jelaga berupa *polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH)*, dimana beberapa diantaranya dikenal sebagai senyawa

karsinogen dan mutagen. Begitu juga dengan dihasilkan jelaga yang bersifat merugikan kesehatan. Untuk mengurangi dampak buruk tersebut, di Amerika Serikat pada tahun 1990 dikeluarkan Amandemen Aksi Udara Bersih (*Clean Air Act Ammendments*) membatasi jumlah partikel yang diijinkan lebih kecil dari 10 mikron. Bahkan pada tahun 1996 regulasinya diperketat lagi menjadi berukuran lebih kecil dari 2,5 mikron. Permasalahan-permasalahan ini mengintensifkan riset lebih jauh dalam kinetika reaksi untuk system pembakaran yang mengandung senyawaan aromatik.

Telah banyak model simulasi untuk oksidasi toluena telah dikembangkan, namun untuk kasus pembakaran suhu yang tinggi belum sepenuhnya bersesuaian dengan data hasil eksperimen. Studi kasus terkait senyawa toluene untuk meneliti profil konsentrasi reaktan, produk intermediate, dan produk akhir yang diproses dalam reactor aliran (flow reactor) melalui analisa kromatografi gas (gas chromatography-GC). Terkait dengan hal ini, proses ignisi senyawa hidrokarbon, dalam cakupan lebih luas, adalah dikendalikan oleh gabungan elemen-elemen radikan antara (transient radical pool) seperti H, OH, C₆H₅, C₆H₅CH₂, CH₃, dan lain-lain. Secara umum belum banyak informasi yang bisa didapatkan untuk mengetahui profil konsentrasi elemen-elemen radikal ini. Pengukuran-pengukuran secara terperinci dari pengamatan terbentuknya elemen-elemen radikal dalam suatu reaksi memberikan beberapa informasi penting mengenai model kinetika reaksi kimia, dimana hal ini akan mengarah pada perbaikan untuk memprediksi parameter-parameter kinetika, yang mana sangat penting untuk mendukung perspektif rekayasa (engineering).

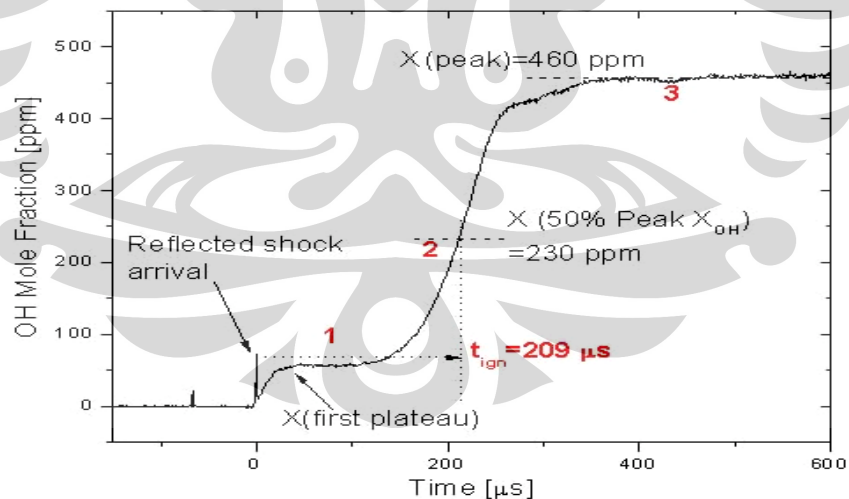
Emdee [2] mengusulkan model oksidasi toluena (EBG model) yang terdiri dari 130 reaksi dan didasarkan pada skema yang umum untuk oksidasi toluena, tetapi hal ini mencakup reaksi toluena + O₂ sebagai satu langkah tambahan. Meskipun didapatkan kesesuaian secara kualitatif yang baik dicapai dari data hasil percobaan, tetapi pada kondisi kandungan kaya bahan bakar, untuk senyawa penol menunjukkan hasil dibawah nilai prediksi sedangkan untuk siklopentadiene menunjukkan sebaliknya. Hal ini kemungkinan disebabkan oleh reaksi penol yang terlalu cepat. Sama halnya untuk senyawa CO yang menunjukkan hasil simulasi dibawah hasil data eksperimen yang menurut Emdee disebabkan oleh

ketidakpastian dalam kimia molekuler. Model prediksi terhadap spesies lainnya juga menunjukkan adanya senyawa siklis keton, yang mana tidak didapatkan secara eksperimen. Diduga senyawa ini langsung terdekomposisi (reaksi unimoluler) menjadi CO dan etilen, yang merupakan suatu reaksi endotermis yang lambat. Dengan demikian, terbentuknya C_5H_4O adalah indikasi dari ketidaklengkapan pengertian dari kimia oksidasi siklopentadiena.

Lindstedt dan Skevis [3] mendalilkan suatu model reaksi dengan 78 spesies dan 395 reaksi, dimana senyawa aromatik berpeluang langsung untuk membentuk spesies C_6 linier. Spesies C_6 yang terbentuk akan terdekomposisi menjadi spesies C_3 dan C_4 , sebagaimana ditunjukkan oleh eksperimennya. Untuk memecahkan adanya pembentukan senyawa C_5H_5 yang signifikan pada hasil simulasinya terhadap nyala api dari percobaan, disini Lindstedt dan Skevis [3] memasukkan linearisasi C_5H_5 , yang mana kemudian akan mengarah pada serangkaian serangan radikal H dan OH yang menghasilkan radikal C_5H_6 yang terdeteksi dari nyala apinya. Reaksi-reaksi abstraksi berkecenderungan untuk membentuk elemen bi-radikal C_5H_2 . Lindstedt dan Skevis mengusulkan suatu reaksi pembakaran senyawa benzena pada temperatur tinggi, yang terdiri dari 514 reaksi. Bermula dari sub-mekanisme benzena dari model toluene, Lindstedt dan Skevis memasukkan kimia metilen dan dekomposisi termal dari radikal penil. Element-element ini adalah yang bertanggungjawab dari reaksi unimolekuler dan bimolekuler berdasarkan kalkulasi Quantum-Rice-Ramsperger-Kassel (QRRK). Untuk menguji modelnya, Lindstedt dan Skevis mensimulasikan flame laminar bertekanan rendah hasil percobaan dari Bittner dan Howard dengan berhasil baik.

Pada hal yang terkait, Lindstedt dan Skevis [3] mengulas kembali mengenai mekanisme oksidasi benzena dan toluena. Ia memasukkan sub-mekanisme toluena model EBG dan beberapa hasil pengukuran kinetika terbaru, dan juga mengatur ulang konstanta laju reaksi untuk mendapatkan kesesuaian yang lebih baik yang merujuk pada data Emdee [2]. Mereka juga menguji model untuk penentuan waktu tunda ignisi toluena yang berdasarkan data Burcat [4] dengan berhasil baik untuk kondisi dengan kandungan bahan bakar rendah dan stoikiometrik. Hasil sebaliknya didapatkan dalam hal menggunakan campuran kaya bahan bakar.

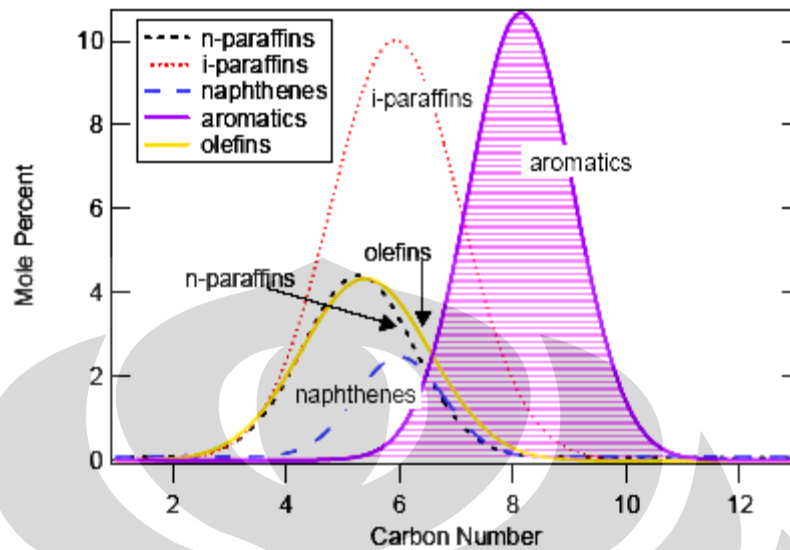
Pada tugas akhir ini, pekerjaan difokuskan untuk simulasi dari model kinetika untuk membandingkan waktu tunda ignisi (ignition delay time) dan profil-profil konsentrasi radikal dan beberapa produk reaksi lainnya yang didapat dari hasil percobaan yang dilakukan oleh Burcat [4] yang dilakukan dengan metoda gelombang kejut terpantulkan (reflected shock waves), analisa sensitifitas dan analisa aliran reaksi untuk mengidentifikasi reaksi-reaksi mana yang dominan (mengendalikan keseluruhan reaksi pembakaran). Kondisi percobaan dilakukan pada rentang temperature 1400 – 2000 K dan tekanan 1,5 – 5,0 atm dengan nisbah kesetaraan (equivalence ratio) 0,5 – 1,875 dan konsentrasi toluene 0,025-0,5 %. Waktu terbentuknya elemen radikal OH diukur dengan absorpsi sinar laser gelombang pendek (*narrow-linewidth ring dye laser absorption*) 306.7 nm. Data waktu ignisi diambil dari produk runutan (*traces*) radikal OH yang bersesuaian dengan data eksperimen pada kondisi percobaan. Waktu tunda ignisi didefinisikan sebagai waktu dimana konsentrasi OH telah mencapai 50 % dari kurva puncak. Sedangkan waktu permulaan ignisi didefinisikan sebagai waktu saat tibanya gelombang pantul dari apparatus percobaan. Gambar 1.2 merepresentasikan profil perubahan konsentrasi OH selama berjalannya reaksi pembakaran.



Gambar 1.2 Penentuan waktu ignisi berdasarkan perubahan konsentrasi radikal OH selama reaksi pembakaran [5]

Bahan bakar yang banyak dipakai, seperti bensin, adalah campuran dari komponen-komponen senyawa hidrokarbon yang berbeda dan juga sangat bergantung pada proses pengilangan, sumber minyak mentah, lokasi geografis tempat asal dan dalam beberapa hal juga bergantung pada musim. Kandungan

komponen-komponen hidrokarbon dalam bensin sebagaimana terjabarkan pada Gambar 1.3.



Gambar 1.3 Distribusi jumlah senyawa hidrokarbon yang terkandung dalam gasolin. [6]

Menurut penelitian, telah diketahui, bahwa nilai-nilai dari Bilangan Oktana Penelitian (Research Octane Number, RON) dan Bilangan Oktana Motor (Motor Octane Number MON) tidak sepenuhnya memenuhi perilaku auto-ignisi pada kondisi tertentu. Oleh karenanya, rancang hitung untuk mesin mesin masa kini menjadi lebih penting, termasuk perbaikan model kimia pembakaran masih merupakan topik yang mendapatkan perhatian luas. Usaha-usaha secara ekstensif telah difokuskan untuk meneliti perilaku kinetika komponen tunggal maupun campurannya yang dapat mngjewantahkan sifat bahan bakar tersebut. Campuran bahan bakar rujukan utama (*Primary Reference Fuel, PRF*) yang terdiri dari n-heptana dan iso-oktana adalah merupakan acuan dasar untuk pemeringkatan bilangan oktan dari gasoline. Table 1.1 menunjukkan data perbandingan dari nilai oktan dengan kandungan konsentrasi tertentu dari toluene .

Tabel 1.1 Pengaruh konsentrasi toluene terhadap nilai oktan [7]

% molar composition	Mixture 1	Mixture 2	Mixture 3
iso-Octane	60	40	40
n-Heptane	8	10	20
Toluene	20	10	10
Methyl cyclohexane	8	40	30
1-Pentene	4	0	0
RON (linear)	93.7	81.7	83.7
MON (linear)	90.6	79.3	79.8
RON (blend)	99.2	94	87.6
MON (blend)	94.5	84.8	82

Usaha-usaha seperti itu dilakukan untuk merepresentasikan masing-masing kelas dari hidrokarbon yang terkandung di dalam bensin, yaitu alkana, iso-alkana, alkena, siklo-alkana, dan aromatik dalam suatu komponen tunggalnya sehingga struktur-struktur molekular yang berbeda dapat diidentifikasi. Tujuannya adalah untuk memvariasikan tingkat campuran, terutama untuk memenuhi angka RON maupun MON. Dalam hal lain, juga memungkinkan untuk memodelkan sifat-sifat fisik gasoline, seperti pembentukan kurva distilasi, viskositas, dan lain-lain melalui pembuatan formula-formula bahan bakar pengganti yang mengandung sejumlah komponen. Pendekatan serupa juga disarankan untuk pemodelan bahan bakar diesel dan bahan bakar pesawat. Dalam hal bahan bakar pengganti yang kompleks ini, karakteristik dimensi dari model kinetika menjadi luas dan gabungan ketidakpastian dari parameter parameter kinetika dan termokimia meningkat secara drastis. Selanjutnya untuk menangani hal ini, proses validasi memerlukan pencocokan dengan sejumlah besar database dari komponen tunggal maupun campurannya, dimana sebagian besar tidak tersedia

1.2 RUMUSAN MASALAH

Berdasarkan latar belakang masalah yang telah dijelaskan di atas maka dibutuhkan adanya suatu model mekanisme oksidasi dan pembakaran toluena yang valid dan representatif untuk kondisi operasi yang luas seperti rentang temperatur, tekanan dan rasio ekivalensi yang lebar sehingga dapat digunakan untuk mengontrol emisi polutan yang terbentuk, waktu tunda ignisi (*ignition delay time*), serta meningkatkan efisiensi pembakaran.

1.3 TUJUAN PENELITIAN

Tujuan dilakukannya penelitian ini adalah

- mendapatkan model kinetika oksidasi dan pembakaran toluena yang berlaku pada rentang temperatur luas, bergantung terhadap tekanan dan memiliki rasio ekivalensi yang tinggi,
- teridentifikasinya tahapan reaksi penting pada oksidasi dan pembakaran toluena melalui analisis reaksi sensitivitas dan analisis aliran reaksi,
- mendapatkan profil *ignition delay* dari reaksi oksidasi dan pembakaran toluena,
- mendapatkan konversi dan profil dari senyawa polutan yang mungkin akan dihasilkan dari reaksi oksidasi dan pembakaran toluena,
- teridentifikasinya kondisi operasi optimum dari reaksi oksidasi dan pembakaran toluena,
- mendapatkan profil konsentrasi yang dihasilkan dari reaksi oksidasi dan pembakaran toluena.

1.4 RUANG LINGKUP MASALAH

Ruang lingkup dari permasalahan yang akan dibahas adalah sebagai berikut:

- pengaruh suhu, tekanan dan rasio ekivalensi dengan rentang tertentu terhadap reaksi oksidasi dan pembakaran toluena. Pada penelitian ini akan digunakan rentang temperatur 950-1100 K, tekanan 25-45 atm, rasio ekivalensi (ϕ) 0,5-1,0 dan pengenceran dengan N_2 dan Ar yang bersifat inert.
- mekanisme oksidasi dikembangkan berdasarkan data-data kinetika reaksi oksidasi dan pembakaran toluena yang sebagian sudah diperbaiki oleh Burcat [4] untuk reaksi hidrokarbon rantai pendek dan data termodinamika yang diperoleh dari literatur,
- sejumlah data kinetika mengalami pengaturan dalam rentang ketidakpastian yang diperbolehkan,
- pada mekanisme oksidasi dan pembakaran toluena yang akan disimulasikan, reaksi berlangsung dalam fasa gas dan pencampuran



dianggap sempurna dan toluena sebagai masukan tunggal bahan bakar tanpa dicampur dengan bahan bakar lain,

- pengembangan model oksidasi toluena menggunakan program yang tersedia di *software* Chemkin 3.7.1.

I.5 SISTEMATIKA PENULISAN

Sistematika penulisan dalam makalah ini adalah sebagai berikut:

BAB I Pendahuluan

Menjelaskan mengenai latar belakang permasalahan, perumusan masalah, tujuan penelitian, ruang lingkup permasalahan, dan sistematika penulisan.

BAB II Kinetika Kimia

Menjelaskan mengenai kinetika kimia secara umum yang meliputi konstanta laju pada reaksi umum, reaksi elementer, pengaruh temperatur dan tekanan pada konstanta laju reaksi, termodinamika dan kinetika, mekanisme reaksi, hukum-hukum dalam reaksi serta parameter-parameter kinetika yang mempengaruhi reaksi oksidasi dan pembakaran toluena.

BAB III Karakteristik Oksidasi dan Pembakaran

Menjelaskan mengenai batas ignisi, *ignition delay time*, oksidasi pada temperatur rendah, oksidasi pada temperatur tinggi, kerusakan oleh *knock* dan oksidasi alkohol.

BAB IV Metodologi Penelitian

Menjelaskan mengenai diagram alir penelitian, mulai dari investigasi mekanisme reaksi untuk sistem oksidasi dan pembakaran, investigasi data kinetika yang terkait, mengembangkan model-model kinetik, validasi model, analisis sensitivitas dan aliran reaksi serta simulasi model yang telah divalidasi dengan data eksperimen.



- BAB V** Validasi Mekanisme
Menjelaskan mengenai validasi mekanisme model kinetika bahan bakar toluena dengan menggunakan data penelitian yang diperoleh dari *shock tube*, *jet stirred reactor* dan *flow reactor*.
- BAB VI** Analisis Mekanisme
Menjelaskan mengenai analisis sensitivitas dan analisis aliran reaksi. Analisis sensitivitas digunakan untuk mengidentifikasi tahapan-tahapan reaksi pembatas laju (*rate-limiting reaction*). Analisis aliran reaksi digunakan untuk menghitung persentase kontribusi reaksi pada pembentukan atau konsumsi spesi kimia.
- BAB VII** Simulasi
Menjelaskan mengenai simulasi oksidasi toluena untuk *shock tube*, *perfectly stirred reactor* (PSR) dan *plug flow reactor* (PFR) dengan memvariasikan temperatur, tekanan dan rasio ekivalensi.
- BAB VIII** Kesimpulan
Menjelaskan mengenai kesimpulan yang diperoleh dari penelitian ini.

BAB II

KINETIKA KIMIA

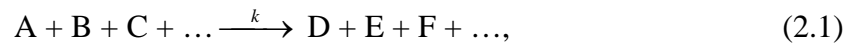
Pada hampir kebanyakan peralatan propulsi, seperti halnya *steam engines* dan *steam turbines*, mesin diesel dan mesin bensin, kendaraan berpenggerak listrik propulsi jet, *ramjet* dan mesin roket adalah sangat bergantung pada keberlangsungan reaksi kimia yang melibatkan satu atau lebih materi (*substance*). Reaksi-reaksi yang terjadi adalah berupa proses reaksi pembakaran atau oksidasi. Materi yang dapat terbakar yang biasanya dirujuk sebagai bahan bakar dan udara atau oksigen sebagai pengoksidasi. Prosesnya itu sendiri dibagi kedalam dua bagian: seberapa cepat reaksi dapat berlangsung dan perubahan kimia apa yang terjadi. Aspek pertama sangat erat kaitannya dengan kinetika kimia yang mana merupakan aspek kimia yang sangat penting dalam hal yang berhubungan dengan nyala api (*flames*). Sedangkan aspek yang kedua terkait dengan termodinamika kimia.

Reaksi kimia terjadi ketika molekul dari suatu senyawa bertumbukan dengan senyawa lain dan dengan adanya tumbukan ini akan dihasilkan molekul baru. Dalam reaksi kimia atom-atom dari molekul yang bereaksi terdistribusi kembali dalam molekul yang baru. Untuk tercapainya hal ini, molekul yang bereaksi harus memiliki energi kinetik yang cukup sehingga ikatan kimianya dapat terputus sehingga ikatan baru yang lain terbentuk. Energi ikatan ini tergantung pada sifat alami atom dan faktor geometri, kandungan energi produk tumbukan mungkin akan berbeda dari kandungan energi molekul yang bertumbukan. Hal ini merupakan dasar dari panas yang dilepaskan atau yang diserap dalam reaksi kimia [8].

2.1 HUKUM LAJU REAKSI GLOBAL

Semua reaksi kimia terjadi pada laju tertentu yang tergantung pada kondisi sistem. Kondisi sistem ini seperti konsentrasi reaktan, temperatur, dan kehadiran suatu katalis atau inhibitor. Laju reaksi dapat dinyatakan sebagai laju

berkurangnya konsentrasi reaktan atau laju bertambahnya produk hasil reaksi. Suatu reaksi global, seperti dibawah ini [9]:



dengan A, B, C menunjukkan senyawa yang terlibat dalam reaksi. Laju reaksi yang dilihat dari konsumsi senyawa A dapat dituliskan sebagai berikut [9]:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^a [B]^b [C]^c \dots, \quad (2.2)$$

[A], [B], [C], adalah konsentrasi senyawa A, B, C, dengan a, b dan c merupakan orde reaksi serta k merupakan koefisien laju reaksi yang spesifik untuk reaksi global dan bukan fungsi dari konsentrasi reaktan.

Dalam suatu sistem reaksi yang tidak terjadi perubahan konsentrasi suatu senyawa sepanjang reaksi, misalnya konsentrasi B dan C tidak berubah maka akan dihasilkan konstanta laju efektif yang dapat dilihat pada persamaan berikut [9]:

$$k_{\text{eff}} = k[B]^b [C]^c \dots, \quad (2.3)$$

sehingga laju reaksinya menjadi [9]

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_{\text{eff}} [A]^a, \quad (2.4)$$

Perubahan konsentrasi senyawa A dapat dihitung dengan mengintegrasikan persamaan diferensial di atas. Untuk reaksi orde pertama ($a=1$), maka hasil integrasinya adalah [9]

$$\ln \frac{[A]_t}{[A]_0} = -k_{\text{eff}} (t - t_0) \quad (2.5)$$

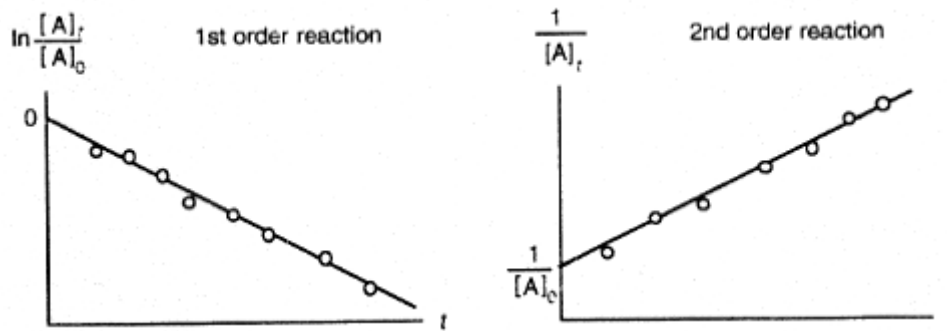
Kemudian, untuk reaksi orde kedua ($a=2$), hasil integrasinya adalah [9]

$$\frac{1}{[A]_t} - \frac{1}{[A]_0} = k_{\text{eff}} (t - t_0), \quad (2.6)$$

dan untuk reaksi orde ketiga ($a=3$), hasil integrasinya adalah [9]

$$\frac{1}{[A]_t^2} - \frac{1}{[A]_0^2} = 2k_{\text{eff}} (t - t_0), \quad (2.7)$$

dengan $[A]_0$ dan $[A]_t$ menyatakan konsentrasi senyawa A pada waktu t_0 and t . Grafik konsentrasi terhadap waktu pada reaksi orde pertama dan orde kedua dapat ditunjukkan sebagai berikut [9] :



Gambar 2.1. Perubahan konsentrasi terhadap waktu pada reaksi orde pertama dan kedua [9].

2.2 REAKSI ELEMENTER

Reaksi elementer terjadi pada tingkat molekular seperti yang dijelaskan pada persamaan reaksi kimia [17].

2.2.1 Hukum Aksi Massa

Hukum aksi massa menyatakan bahwa menghilangnya suatu senyawa kimia sebanding dengan perkalian konsentrasi senyawa kimia yang bereaksi, dimana setiap konsentrasi yang dipangkatkan dengan koefisien stoikiometri. Hal ini hanya berlaku untuk reaksi elementer. Suatu reaksi elementer umum dapat ditulis berikut ini [8]:



dengan R adalah reaktan, P adalah produk dan M adalah suatu senyawa yang muncul di kedua sisi. Laju konsumsi reaktan dan pembentukan produk dapat ditulis pada persamaan berikut [8]:

$$\begin{aligned} \frac{d[R_1]}{dt} &= -a_1r, & \frac{d[R_2]}{dt} &= -a_2r, & \frac{d[R_3]}{dt} &= -a_3r, \dots \\ \frac{d[P_1]}{dt} &= b_1r, & \frac{d[P_2]}{dt} &= b_2r, & \frac{d[P_3]}{dt} &= b_3r, \dots \\ \frac{d[M]}{dt} &= b_M r - a_M r \end{aligned} \quad (2.9)$$

dengan r merupakan laju reaksi [8]

$$r = k[R_1]^{a_1} [R_2]^{a_2} [R_3]^{a_3} \quad (2.10)$$

Persamaan 2.8 menunjukkan reaksi stoikiometri: setiap a_1 mol R_1 bereaksi dengan a_2 mol R_2 , a_3 mol R_3 dan seterusnya, untuk menghasilkan b_1 mol P_1 , b_2 mol P_2 , b_3 mol P_3 dan seterusnya. Jadi banyaknya R_1 yang bereaksi berhubungan dengan banyaknya R_2 , R_3 , dan seterusnya yang telah bereaksi. Jika $b_M = a_M$, M disebut sebagai *third body*. Senyawa ini mungkin tidak berubah tetapi kehadirannya cukup penting untuk keberhasilan suatu reaksi, yaitu untuk menyediakan energi atau mengambil energi dari tumbukan antara reaktan [8].

2.2.2 Tipe Reaksi Elementer

Reaksi elementer dapat diklasifikasikan berdasarkan banyaknya molekul reaktan yang terlibat. Orde keseluruhan ataupun jumlah molekul yang terlibat dalam reaksi disebut juga molekularitas. Berdasarkan molekularitas tipe reaksi elementer adalah sebagai berikut [8]:

1. Reaksi unimolekular [8]



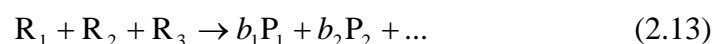
Reaksi di atas merupakan gambaran ideal, karena molekul tidak mengalami disintegrasi secara spontan. Maka agar dapat terjadi reaksi, diperlukan adanya tumbukan dengan molekul lain (dengan cara membuat reaksi secara efektif menjadi orde 2). Laju reaksi orde pertama, $r = -k [R_1]$ dan k merupakan koefisien laju reaksi dengan satuan (1/s).

2. Reaksi bimolekular [8]



Reaksi ini adalah reaksi yang paling umum yang terjadi dalam pembakaran karena sangat besar kemungkinan terjadinya tumbukan antara dua molekul yang ada. Laju reaksi orde kedua, $r = -k [R_1][R_2]$, dan k merupakan koefisien laju reaksi dengan satuan $(\text{mol}/\text{cm}^3)^{-1}\text{s}^{-1}$.

3. Reaksi trimolekular [8]



Kemungkinan terjadinya tumbukan tiga molekul secara simultan cukup kecil, akan tetapi reaksi orde ketiga merupakan reaksi yang sangat penting. Sebagai contoh, reaksi rekombinasi radikal antara radikal OH dan H untuk

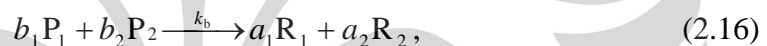
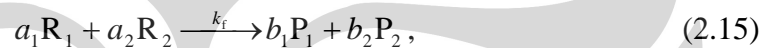
membentuk air akan terjadi jika terdapat suatu *third body*, M, yang terlibat dalam tumbukan, dan dengan demikian reaksi ini merupakan reaksi orde ketiga. *Third body* dibutuhkan karena reaksi rekombinasi ini bersifat eksotermik dan *third body* harus menyerap sebagian energinya. Laju reaksi orde ketiga, $r = -k [R_1][R_2][R_3]$, dan k merupakan koefisien laju reaksi dengan satuan $(\text{mol}/\text{cm}^3)^{-2}\text{s}^{-1}$.

2.2.3 Reaksi ke Kanan dan ke Kiri

Reaksi elementer dapat berlangsung dalam dua arah yaitu ke kanan dan ke kiri. Dengan demikian, produk dapat menjadi reaktan dan sebaliknya. Umumnya, laju reaksi spesifiknya sangat berbeda. Sebagai contoh, suatu reaksi [8]



hal ini berarti bahwa reaksi diatas ekivalen dengan mekanisme berikut [8]



sehingga laju reaksinya adalah [8]

$$\frac{d[R_1]}{dt} = -a_1k_f[R_1]^{a_1}[R_2]^{a_2} + a_1k_b[P_1]^{b_1}[P_2]^{b_2} \quad (2.17)$$

2.3 KETERGANTUNGAN KOEFISIEN LAJU REAKSI TERHADAP TEMPERATUR

Berdasarkan hukum Arrhenius, koefisien laju reaksi dapat ditulis sebagai berikut [9]:

$$k = A \exp\left[-\frac{E_a}{RT}\right] \quad (2.18)$$

dengan E_a adalah energi aktivasi. Nilai E_a berasal dari hasil eksperimen atau dari perhitungan mekanika statistik [9].

Tidak semua tumbukan molekular akan menghasilkan suatu reaksi, tetapi hanya yang memiliki energi kinetik yang lebih tinggi daripada energi yang dibutuhkan untuk memutuskan ikatan dari molekul reaktan. Energi penghalang ini disebut energi aktivasi. Nilai maksimumnya menunjukkan energi ikatan dalam

suatu molekul. Pada reaksi disosiasi, energi aktivasi hampir mendekati energi ikatan yang akan diputuskan. Nilai energi aktivasi mungkin dapat lebih kecil atau bahkan nol [9].

Karena reaksi biner elementer menunjukkan kesesuaian dengan hukum Arrhenius pada rentang temperatur sedang, ketergantungan temperatur biasanya digabungkan dengan eksponen tersendiri. Akan tetapi untuk rentang temperatur yang luas yang ditemukan dalam pembakaran, perilaku “non-Arrhenius” pada koefisien laju cenderung terjadi, terutama untuk proses yang memiliki energi *barrier* yang kecil. Oleh karena itu, penggunaan persamaan Arrhenius yang dimodifikasi yang menunjukkan pengaruh temperatur terhadap koefisien laju sangat penting [18],

$$k = AT^b \exp\left[-\frac{E_a}{RT}\right]. \quad (2.19)$$

2.4 KETERGANTUNGAN KOEFISIEN LAJU REAKSI TERHADAP TEKANAN

Ketergantungan koefisien laju reaksi disosiasi (unimolekular) dan rekombinasi (bimolekular) pada tekanan merupakan suatu indikasi bahwa reaksi-reaksi ini tidak elementer. Reaksi-reaksi tersebut merupakan suatu rangkaian dari reaksi-reaksi. Pada kasus yang paling sederhana, ketergantungan pada tekanan dapat dimengerti menggunakan model Lindemann. Mengacu pada model ini, suatu reaksi dekomposisi unimolekular hanya mungkin terjadi jika energi pada molekul cukup untuk memutuskan ikatan. Oleh karenanya, agar reaksi dekomposisi dapat terjadi, energi harus ditambahkan kepada molekul melalui tumbukan dengan molekul lainnya, M (untuk eksitasi dari vibrasi molekular). Molekul tereksitasi kemudian terdekomposisi menjadi produk bergantung pada kekuatan eksitasi, atau terdeaktivasi melalui suatu tumbukan kedua [9],



dimana A^* adalah molekul tereksitasi, k_a , k_{-a} dan k_u adalah koefisien laju aktivasi, deaktivasi dan reaksi unimolekular. Laju rangkaian-rangkaian dari reaksi ini adalah [9]:

$$\frac{d[P]}{dt} = k_u [A^*], \quad (2.23)$$

dan

$$\frac{d[A^*]}{dt} = k_a [A][M] - k_{-a} [A^*][M] - k_u [A^*]. \quad (2.24)$$

Dengan mengasumsikan bahwa konsentrasi dari intermediet reaktif A^* berada pada *quasi-steady state* [9]

$$\frac{d[A^*]}{dt} \approx 0, \quad (2.25)$$

dapat diperoleh [9]

$$[A^*] = \frac{k_a [A][M]}{k_{-a} [M] + k_u}, \quad (2.26)$$

dan [9]

$$\frac{d[P]}{dt} = \frac{k_u k_a [A][M]}{k_{-a} [M] + k_u}. \quad (2.27)$$

Dua kondisi ekstrim dari reaksi, pada tekanan sangat rendah dan sangat tinggi, dapat dibedakan dari Persamaan 2.27. Pada rentang tekanan yang rendah, konsentrasi rekan tumbukan M sangat kecil dan $k_{-a} [M] \ll k_u$. Oleh karenanya, laju orde kedua dapat diperoleh [9]

$$\frac{d[P]}{dt} = k_a [A][M]. \quad (2.28)$$

Laju reaksi sekarang sebanding dengan konsentrasi senyawa A dan rekan tumbukan M , karena aktivasinya lambat (pembatas laju) pada tekanan rendah.

Pada rentang tekanan yang tinggi, konsentrasi rekan tumbukan M besar dan $k_{-a} [M] \gg k_u$. Hal ini memberikan laju orde pertama [9]

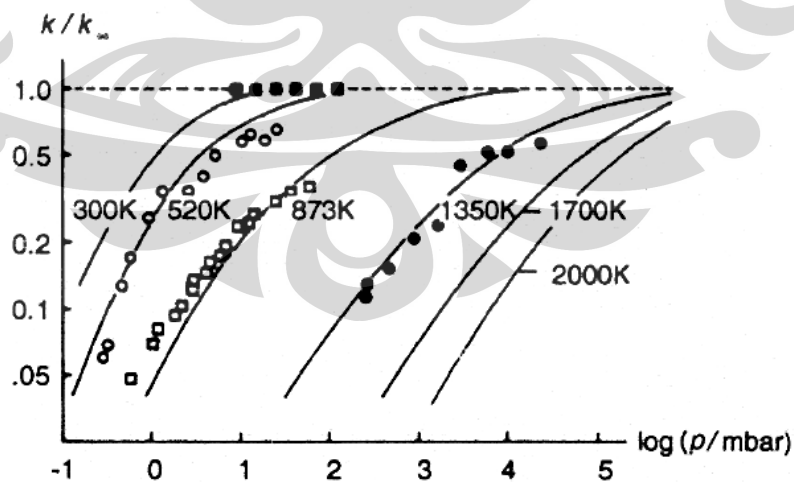
$$\frac{d[P]}{dt} = \frac{k_u k_a}{k_{-a}} [A] = k_{\infty} [A]. \quad (2.29)$$

Di sini laju reaksi tidak bergantung pada konsentrasi rekan tumbukan, karena pada tekanan tinggi tumbukan sering terjadi dan dekomposisi molekul teraktivasi A^* merupakan pembatas laju, bukan aktivasi.

Mekanisme Lindemann mengilustrasikan fakta bahwa orde reaksi dari reaksi kompleks (bukan elementer) bergantung pada kondisi yang dipilih. Meskipun demikian, mekanisme Lindemann sendiri merupakan model yang disederhanakan.

Jika laju suatu reaksi unimolekular dihitung sebagai $d[P]/dt = k_a[A]$, koefisien laju k bergantung pada tekanan dan temperatur. Teori reaksi unimolekular menghasilkan kurva *fall-off*, yang menggambarkan ketergantungan k pada tekanan untuk temperatur berbeda. Logaritma koefisien laju biasanya diplot terhadap logaritma tekanan.

Kecenderungan kurva *fall-off* ditunjukkan pada Gambar 2.2. Pada temperatur yang sangat tinggi, $k = k_u k_a [M] / (k_a [M] + k_u)$ mendekati limit k_∞ , koefisien laju menjadi tidak bergantung pada tekanan. Pada tekanan yang sangat rendah, koefisien laju k sebanding dengan $[M] = p/RT$, yang menghasilkan ketergantungan linear. Hal yang sama juga berlaku, jika energi aktivasi efektif rendah, koefisien laju reaksi k akan menurun dengan menurunnya temperatur.



Gambar 2.2. Kurva *fall-off* untuk reaksi unimolekular $C_2H_6 \rightarrow \dot{C}H_3 + \dot{C}H_3$ [9].

Gambar 2.2 menunjukkan kurva *fall-off* untuk reaksi unimolekular yang sangat bergantung pada temperatur, dan bahwa koefisien laju menunjukkan perbedaan ketergantungan temperatur pada nilai tekanan yang berbeda [9].

2.5 TERMODINAMIKA DAN KINETIKA

Pada reaksi yang memiliki arah ke kanan dan ke kiri, kesetimbangannya bersifat dinamis. Laju kedua arah adalah sama sehingga kesetimbangan konsentrasi dipertahankan. Untuk reaksi berikut [8]



hubungan ini muncul pada kesetimbangan [8]

$$\frac{r_f}{r_b} = \frac{k_f [A]_{eq} [B]_{eq}}{k_b [C]_{eq} [D]_{eq}} = 1, \quad (2.31)$$

dimana r_f dan r_b adalah laju reaksi ke kanan dan ke kiri dan subskrip eq mengacu ke kesetimbangan. Oleh karenanya [8]

$$\frac{k_f}{k_b} = \frac{[C]_{eq} [D]_{eq}}{[A]_{eq} [B]_{eq}}, \quad (2.32)$$

$$\frac{k_f}{k_b} = K_{11}, \quad (2.33)$$

dimana K_{11} adalah konstanta kesetimbangan.

Suatu laju reaksi terkadang lebih mudah diukur pada satu arah daripada arah lainnya. Sebagai contoh, rekombinasi radikal metil untuk membentuk etana [8]



telah dipelajari pada rentang tekanan dan temperatur yang luas. Reaksi dekomposisi ke kiri penting pada proses temperatur tinggi, seperti pembakaran, dan kita harus menaruh perhatian terhadap nilai k_{-2} . Laju dekomposisi telah dihitung, namun sulit membuat pengukuran untuk rentang temperatur yang luas. Koefisien laju adalah konstan (pada P dan T tertentu) dan tidak berubah selama kesetimbangan dicapai. Oleh karenanya, sangat mungkin untuk menggunakan nilai terukur k_2 dan konstanta kesetimbangan K_2 untuk menghitung nilai koefisien laju disosiasi k_{-2} [8].

$$k_{-2} = \frac{k_2}{K_2}. \quad (2.35)$$

Pada umumnya, koefisien laju memiliki unit konsentrasi sehingga K_2 di Persamaan 2.35 adalah K_c . Konstanta K_c ini dapat dikonversi ke K_p (suatu konstanta kesetimbangan yang dinyatakan dalam bentuk kesetimbangan tekanan) melalui [8]

$$K_c = \frac{K_p}{p^0 RT}, \quad (2.36)$$

dimana p^0 adalah tekanan standar, dan Persamaan 2.35 menjadi [8]

$$k_{-2} = \frac{k_2}{\left(\frac{K_p}{p^0 RT}\right)}. \quad (2.37)$$

Dengan menggunakan hubungan antara K_p / p^0 dan perubahan pada energi reaksi standar Gibbs, ΔG^0 [8]

$$\Delta G^0 = -RT \ln \frac{K_p}{p^0} \quad (2.38)$$

dan hubungan antara ΔG^0 dan perubahan pada entalpi standar dan entropi reaksi, ΔH^0 dan ΔS^0 [8]

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0, \quad (2.39)$$

persamaan berikut dapat diperoleh [8]

$$k_{-2} = k_2 RT \exp\left(\frac{\Delta H_T^0}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta S_T^0}{R}\right), \quad (2.40)$$

dimana ΔH_T^0 dan ΔS_T^0 adalah entalpi standar dan entropi standar reaksi pada temperatur T [8]:

$$\Delta H_T^0 = \Delta H_{ft}^0(C_2H_6) - 2\Delta H_{ft}^0(CH_3), \quad (2.41)$$

$$\Delta S_T^0 = S_T^0(C_2H_6) - 2S_T^0(CH_3) \quad (2.42)$$

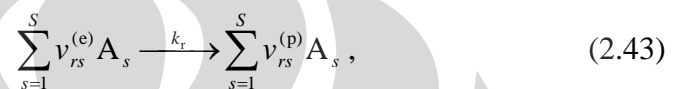
dimana ΔH_{ft}^0 dan S_T^0 adalah entalpi molar standar pembentukan dan hukum ketiga entropi molar untuk spesi tertentu pada temperatur T [8].

2.6 MEKANISME REAKSI

Jika banyak terdapat reaksi elementer, jumlah bersih dari reaktan yang dikonsumsi atau produk yang dihasilkan akan muncul dari penambahan kontribusi dari tiap reaksi elementer.

Pada umumnya, spesi akan mengambil bagian pada beberapa reaksi sebagai reaktan dan di lainnya sebagai produk. Laju produksi dan konsumsi merupakan hasil bersih dari seluruh reaksi elementer.

Untuk suatu mekanisme yang terdiri dari R reaksi elementer, yang tersusun dari S spesi, yang diberikan oleh [9]



dimana $r=1, 2, \dots, R$, $v_{rs}^{(e)}$ dan $v_{rs}^{(p)}$ menunjukkan koefisien stoikiometri reaktan dan produk, laju pembentukan suatu spesi i diperoleh dari penambahan seluruh persamaan laju dimana spesi i terlibat [9],

$$\left(\frac{\partial c_i}{\partial t} \right)_{\text{chem}} = \sum_{r=1}^R k_r (v_{ri}^{(p)} - v_{ri}^{(e)}) \prod_{s=1}^S c_s^{v_{rs}^{(e)}}, \quad (2.44)$$

dimana $i=1, 2, \dots, S$ [9].

2.6.1 Reaksi Rantai

Pembakaran hidrokarbon muncul melalui reaksi rantai, yaitu proses yang menghasilkan produk yang menginisiasi proses selanjutnya dengan jenis yang sama, yang disebut rangkaian yang mampu bertahan sendiri. Reaksi-reaksi di bawah adalah contoh reaksi-reaksi rantai [8].



Reaksi 2.45 adalah reaksi inisiasi rantai, dimana suatu intermediet reaktif dibentuk dengan bantuan suatu agen seperti panas atau oksigen molekular. Reaksi 2.46 adalah suatu reaksi pencabangan rantai yang menghasilkan lebih banyak radikal. Reaksi 2.47 adalah reaksi perambatan rantai, dimana radikal dapat

berubah identitas, namun jumlahnya tidak berubah. Reaksi 2.48 adalah reaksi terminasi rantai, dimana radikal dikonsumsi dan rantai terputus.

Reaksi rantai adalah hal yang sangat penting untuk pembakaran. Nyala tidak akan dapat bertahan sendiri jika kimianya tidak memiliki sifat ini. Dengan reaksi rantai, laju reaksi dapat bertambah secara eksponensial dan menyebabkan ledakan. Pada nyala normal, hal ini tidak terjadi karena panas dipindahkan dari daerah reaksi oleh difusi atau konveksi, dan karena konsumsi bahan bakar [8].

2.6.2 Analisis Mekanisme Reaksi

Mekanisme reaksi detail untuk pembakaran hidrokarbon dapat terdiri dari beberapa ribu reaksi elementer. Namun, banyak dari reaksi-reaksi ini tidak penting dan dapat diabaikan. Oleh karenanya, dibutuhkan metode analisis untuk menghilangkan reaksi-reaksi yang dapat diabaikan. Beberapa metode dapat digunakan. Analisis sensitivitas mengidentifikasi langkah reaksi pembatas laju (*rate-limiting reaction step*). Analisis aliran reaksi menentukan karakteristik jalur reaksi. Informasi yang diperoleh dari metode-metode ini dapat digunakan untuk menghilangkan reaksi-reaksi yang tidak penting dan menghasilkan mekanisme reaksi yang tersederhanakan atau tereduksi [9].

2.6.2.1 Analisis Sensitivitas

Hukum laju dari suatu mekanisme reaksi yang terdiri dari R reaksi diantara S spesi dapat ditulis sebagai suatu sistem persamaan diferensial biasa orde pertama [9],

$$\frac{dc_i}{dt} = F_i(c_1, \dots, c_S; k_1, \dots, k_R), \quad i=1, 2, \dots, S \quad (2.49)$$

$$c_i = c_i^0 \text{ pada } t = t_0$$

Waktu t adalah variabel independen, konsentrasi c_i dari spesi i adalah variabel dependen, dan k_r , parameter sistem; c_i^0 menyatakan kondisi awal.

Hanya koefisien laju dari reaksi kimia yang dipertimbangkan sebagai parameter sistem. Konsentrasi awal, tekanan, dsb dapat menjadi parameter sistem jika diinginkan. Solusi dari sistem persamaan diferensial 2.49 bergantung pada kondisi awal dan juga parameter.

Untuk sebagian besar reaksi elementer, perubahan parameter sistem (koefisien laju) hampir tidak memiliki pengaruh pada solusi yang bergantung pada waktu. Bahkan jika reaksinya termasuk secara eksplisit pada mekanisme, itu tidak memerlukan koefisien laju yang sangat akurat. Di sisi lain, untuk sebagian kecil dari reaksi elementer, perubahan koefisien laju memiliki pengaruh yang besar pada keluaran sistem. Akibatnya, koefisien laju yang akurat diperlukan. Beberapa langkah reaksi penting ini adalah penentu laju (*rate-determining steps*) atau pembatas laju (*rate-limiting steps*).

Ketergantungan solusi c_i pada parameter k_r disebut sensitivitas. Sensitivitas absolut ($E_{i,r}$) dan sensitivitas relatif ($E_{i,r}^{rel}$) dapat didefinisikan sebagai [9]

$$E_{i,r} = \frac{\partial c_i}{\partial k_r} \quad \text{dan} \quad (2.50)$$

$$E_{i,r}^{rel} = \frac{k_r}{c_i} \frac{\partial c_i}{\partial k_r} = \frac{\partial \ln c_i}{\partial \ln k_r}. \quad (2.51)$$

2.6.2.2 Analisis Aliran Reaksi

Analisis aliran reaksi menghitung persentase kontribusi dari reaksi-reaksi yang berbeda terhadap pembentukan atau konsumsi spesi kimia. Suatu contoh analisis aliran reaksi diberikan di Tabel 2.1.

Tabel 2.1. Bagan ilustrasi output dari suatu analisis aliran reaksi [9].

Reaksi	Spesi					
	1	2	3	...	S-1	S
1	20%	3%	0	...	0	0
2	0	0	0	...	0	0
3	2%	5%	0	...	100%	90%
.
.
.
R-1	78%	90%	100%	...	0	5%
R	0	2%	0	...	0	0

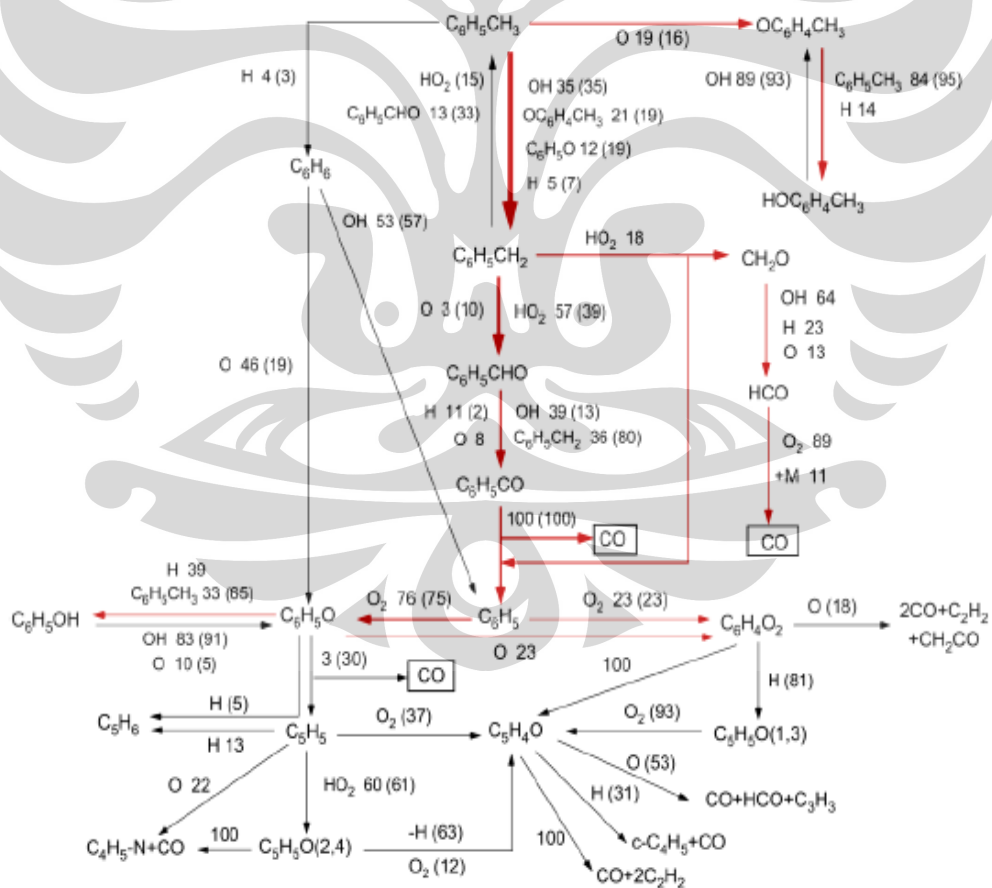
Pada contoh ini, 20% pembentukan spesi 1 berasal dari Reaksi 1, 2% dari Reaksi 3 dan 78% dari Reaksi R-1. Persentase total dari seluruh kontribusi harus 100%.

Tabel seperti di atas memperbolehkan konstruksi diagram aliran reaksi yang instruktif [9].

2.7 TAHAPAN REAKSI PEMBAKARAN TOLUENA

Mekanisme reaksi yang disusun dalam makalah ini terdiri dari 93 spesies dan 617 reaksi elementer (Wang, 1998) yang didasarkan pada oksidasi toluena dan benzena pada temperatur tinggi.

Model kinetika terperinci termasuk untuk reaksi-reaksi yang melibatkan H₂/O₂, senyawa hidrokarbon sederhana (C₁-C₄), peluluhan dan oksidasi pada cincin aromatik termasuk rantai sampingnya. Ringkasan dari keseluruhan reaksi-reaksi yang terjadi pada pembakaran toluena dipaparkan pada Gambar 2.3. Paparan mekanisme reaksi selengkapnya dipaparkan pada Lampiran A.



Gambar 2.3 Pola sebaran spesi pada reaksi pembakaran toluena [22]

2.7.1 Reaksi H₂/O₂

Kinetika reaksi H₂/O₂ sebagian besar didasarkan pada GRI-Mech, suatu model yang dioptimalkan untuk pembakaran metana, versi 1.2 (Freanklach 1995). Beberapa parameter laju reaksi sudah disesuaikan berdasarkan hasil percobaan terkini. Sebagai contoh, parameter laju reaksi untuk reaksi :



Dimana M=N₂ dan Ar, diambil dari Davidson (1996).

2.7.2 Reaksi C₁-C₄

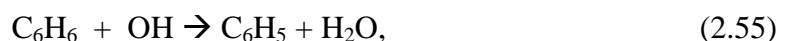
Pada mulanya sifat sifat kimia (*chemistry*) kebanyakan diambil dari GRI-Mech. Namun pada saat ini kemajuan yang cukup berarti telah telah didapatkan dalam hal pengertian kinetika kimia untuk radikal vinil (*vinyl*), yang sangat penting untuk mempelajari reaksi oksidasi ethene dan ethyne. Saat setelah mulainya reaksi oksidasi, cincin aromatik terpecah secepatnya menjadi senyawa antara C₂ dan C₃. Mekanisme kinetika kimia terkait dikembangkan merujuk pada hasil percobaan yang diterbitkan dan hasil perhitungan Rice-Ramsperger_Kassel-Marcus (RRKM) untuk penentuan atau ekstrapolasi koefisien laju reaksi pada tekanan dan temperatur tertentu. Sifat-sifat kimia dari C₄H₂ dan C₄H₄ juga dimasukkan pada percobaan tersebut untuk meng-*cover* kondisi umpan kaya bahan bakar pada reaksi pembakaran C₂ dan C₃.

2.7.3 Reaksi C₅ dan C₆

Telah disetujui bahwa pada sistem homogen, pada saat awal oksigen akan menarik hidrogen dari benzena,



yang menghasilkan spesies radikal bebas. Segera setelah kumpulan radikal (*radikal poo*) terbentuk, peluluhan (*destruction*) benzena berlangsung melalui abstraksi (*abstraction*) hidrogen atau serangan atom Oksigen untuk menghasilkan radikal penil (*phenyl*) dan radikal penoksi (*phenoxy*) dan penol (*phenol*) :





Walaupun reaksi oksidasi benzena secara percobaan telah diteliti, namun hanya laju keseluruhan yang bisa ditentukan. Dalam studi ini, diasumsikan bahwa setiap tiga ikatan pertama akan menyumbang 1/3 dari keseluruhan reaksi.

Untuk abstraksi oleh atom H :



koefisien laju reaksi ditentukan oleh beberapa hasil studi *shock tube* pada temperatur tinggi (Fuji dan Asaba 1971). Sedangkan hasil studi teoritis telah dilakukan oleh Mebel (1997) untuk menguji data hasil percobaan dan menentukan koefisien laju reaksi pada rentang temperatur 300 – 5000 K. Mebel juga mempelajari reaksi addisi hidrogen dengan benzena yang menghasilkan radikal sikloheksadienil (*cyclohexadienyl*). Sebagaimana juga telah dipelajari oleh Nicovich dan Ravishankara (1984), reaksi ini penting pada temperatur rendah, tetapi pada temperatur diatas 600 K reaksi balik akan mendominasi, dalam hal ini hanya reaksi abstraksi yang terjadi.

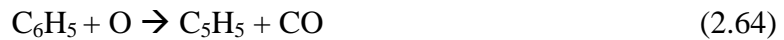
2.7.4 Reaksi Radikal Penil

Radikal penil bereaksi dengan molekul oksigen yang menghasilkan elemen penoksi dan benzokuinon (*benzoquinone*) :

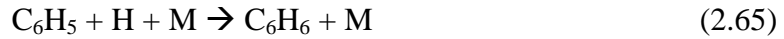


Hasil penelitian Lintedt [3] menunjukkan bahwa rasio percabangan kearah produk benzokuinon adalah 3:1. Sedangkan Burcat [4] melakukan percobaan reaksi $\text{C}_6\text{H}_5 + \text{O}_2$ pada rentang 297 - 473 K. Mereka mendapatkan korelasi kesesuaian antara koefisien laju reaksi antara perhitungan teori RRKM dengan data percobaannya pada temperatur rendah maupun hasil penelitian Lintedt [3] pada temperatur tinggi.

Menurut Frank (1994), radikal penil bereaksi dengan radikal Oksigen secara cepat dengan melepaskan CO dan menghasilkan radikal siklopentadienil :



Penil dan radikal hidrogen bergabung kembali untuk membentuk benzena setelah stabilnya tumbukan :



Koeffisien laju reaksi yang bergantung pada tekanan diperoleh dari hasil penelitian Davis (1996).

Terkait dengan reaksi yang melibatkan OH dan HO₂, penil dapat dirubah menjadi penoksi :



Data kinetika dari percobaan untuk reaksi diatas belum tersedia, sedangkan koeffisien laju reaksi adalah ditentukan secara perkiraan.

2.7.5 Reaksi Radikal Penoksi

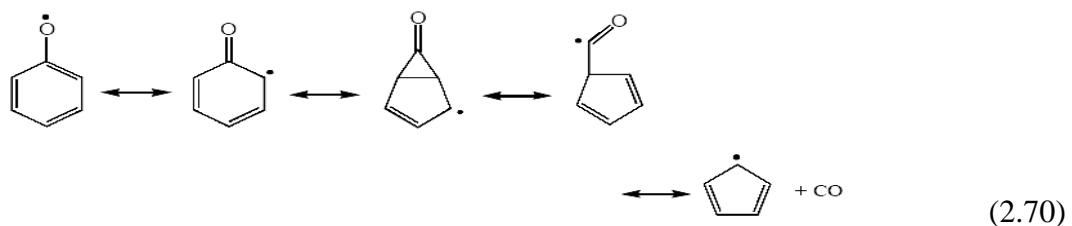
Radikal penoksi dapat menggabungkan hidrogen untuk membentuk penol dengan mengadopsi parameter RRKM hasil percobaan Davis (1996) :



Sedangkan menurut Buth (1996), oksigen dapat menggantikan *p*-hidrogen dari radikal penoksi dimana dari reaksi ini akan dihasilkan benzokinon :



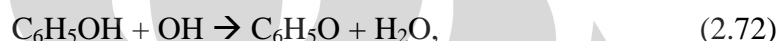
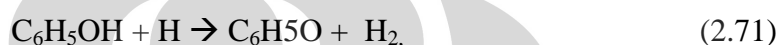
Hasil studi percobaan dan teoritis menunjukkan bahwa elektron tak berpasangan (*unpaired*) pada radikal penoksi secara nyata digantikan dari atom oksigen kearah cincin sistem Phi, mensyaratkan bahwa ikatan CO bisa menyerupai karbonil yang berikatan ganda. Hal ini bersesuaian bahwa dekomposisi termal dari penil akan mengarah pada pembentukan radikal siklopentadienil dan karbon monoksida :



Hasil perhitungan laju reaksi model RRKM untuk dekomposisi penoksi yang didasarkan pada hasil penelitian oleh Wing Tsang [6] bersesuaian dengan hasil perhitungan dan data hasil percobaannya. Sedangkan koefisien laju yang digunakan adalah diadopsi dari Linstedt [3].

2.7.6 Reaksi-reaksi Penol

Hidrogen yang terikat secara lemah pada grup penol dapat secara mudah dilepaskan (abstraksi) oleh radikal-radikal H, OH atau O untuk menghasilkan radikal penoksi :



Korelasi laju reaksi hasil penelitian D.F. Davidson [5] untuk abstraksi oleh OH telah dipelajari lebih jauh yang diaplikasikan pada kondisi temperatur rendah.

Radikal hidrogen dapat juga menggantikan grup hidroksi untuk menghasilkan benzena (studi He 1988) :



2.7.7 Reaksi-reaksi Benzokinon

Sifat-sifat yang terkait secara kimia (*chemistry*) belum diketahui secara pasti. Emdee [2] mengusulkan bahwa reaksi dekomposisi sebagai berikut :



Sedangkan Wing Tsang [6] mengusulkan reaksi tambahan untuk destruksi benzokinon oleh radikal O dan H :

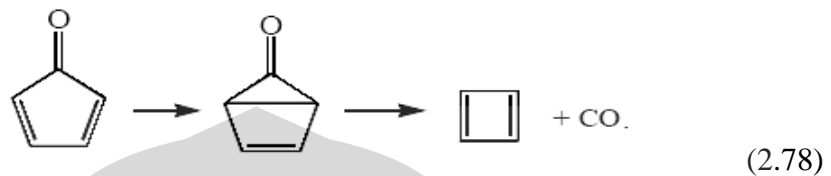


2.7.8 Reaksi-reaksi Radikal Siklopentadienil dan Siklopentadiene

Dari hasil observasi pada percobaan oksidasi aromatik telah didapatkan adanya konsentrasi yang signifikan untuk radikal siklopentadienil. Dengan adanya stabilisasi resonansi, siklopentadienil adalah cukup stabil sehingga bisa bertahan lebih lama pada kondisinya. Sedangkan untuk siklopentadiene, menurut studi

kinetika benzena oleh Emdee dan Brezinsky [2] maupun oleh Bozelli [22] menyatakan bahwa stabilitas termal termasuk untuk spesies turunannya masih sangat sedikit informasi yang bisa didapatkan.

Usulan mekanisme dekomposisi siklopentadienon disederhanakan menurut reaksi berikut :



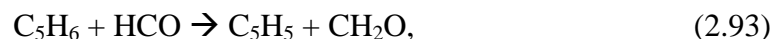
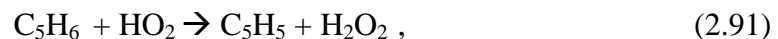
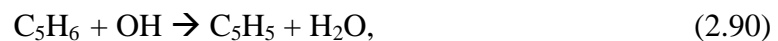
Hal hal yang terkait dengan sifat kimia dari siklopentadiene dan siklopentadienil diadopsi dari hasil studi Zhong dan Bozelli (1997, 1998). Untuk radikal siklopentadienil, model terkini mencakup reaksi-reaksi berikut :



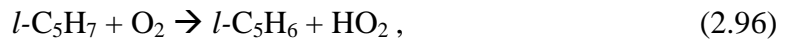
Sedangkan untuk siklopentadiene, mencakup reaksi reaksi berikut ini :



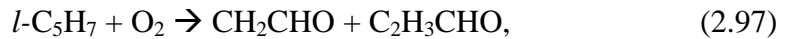
Untuk model terkini yang memasukan reaksi abstraksi H oleh radikal yang muncul dari reaksi pembakaran :



Radikal 1,3 pentadiene-5yl diharapkan akan kehilangan β -hidrogen dan berubah menjadi :



atau terdisintegrasi melalui reaksi berikut :



sedangkan $l\text{-C}_5\text{H}_6$ dapat bergabung dengan atom H menjadi :



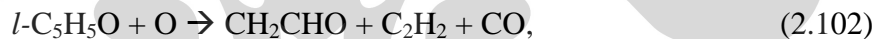
atau bereaksi dengan atom H yang menghasilkan etilen (*ethene*) dan radikal propargil :



Sedangkan karbonil linear $l\text{-C}_5\text{H}_5\text{O}$ diharapkan akan dengan mudah melepaskan grup CO melalui salah satu cara dekomposisi unimolekuler :



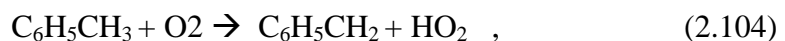
atau bereaksi dengan radikal dari reaksi pembakaran (*flame*):2.101)



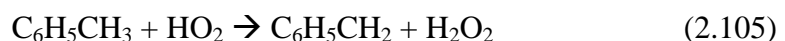
Koeffisien laju reaksi untuk spesies non-siklis C5 adalah merupakan harga yang diperkirakan.

2.7.9 Reaksi Toluene

Pada mulanya, hydrogen yang berikatan dengan benzena dilepaskan dari toluene oleh O_2 yang menghasilkan radikal benzyl yang terstabilkan secara resonansinya :



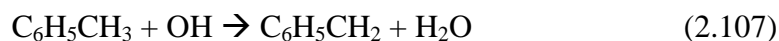
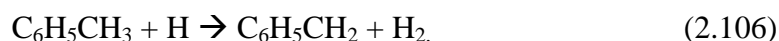
dan selanjutnya



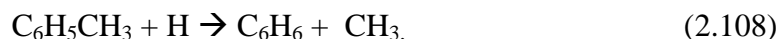
Laju reaksi untuk reaksi diatas telah diamati oleh Burcat [4] pada tekanan moderat dan dengan rentang temperature 1050 – 1400 K.



Saat kumpulan radikal telah terbentuk, *benzylic hydrogen* dapat diabstraksi oleh H maupun OH :



Walaupun rantai samping alipatik yang lebih memungkinkan untuk bereaksi pertama kali, toluena pun dapat menjalani hal serupa oleh radikal hydrogen :



atau terjadi reaksi addisi elektropilik dengan radikal oksigen :



Banyak pengamatan yang telah dilakukan dengan metode *shock tube* yang menunjukkan bahwa toluena menjalani reaksi dekomposisi unimolekuler, dengan melepaskan rantai sampingnya:



Reaksi lainnya mengarah pada reaksi yang menghasilkan radikal benzyl dan hydrogen :



yang menunjukkan reaksi lebih cepat, tetapi hal ini disebabkan laju reaksi penggabungan ulang yang cepat dari penil dengan metal.

2.7.10 Reaksi Radikal Benzyl

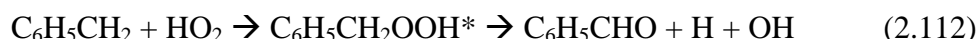
Pengecualian untuk dekomposisi termal, data kinetika kimia dari radikal benzyl masih sangat terbatas. Model yang ada dari Emdee [2] kebanyakan masih merupakan data estimasi untuk mendapatkan kesesuaian dengan kumpulan data eksperimen tertentu.

D.F. Davidson [5] mengamati oksidasi radikal benzyl pada percobaan *shock tube* pada rentang temperatur 1200 – 1500 K, dimana ditemukan tidak ada bukti reaksi moluler oksigen dengan radikal benzyl, malahan teramati peluruha O₂ pada reaksi sekunder. Pengamatan selanjutnya oleh Burcat [4] menyatakan bahwa reaksi penggabungan (*adduct*) tampak pada temperature dibawah 600 K, tetapi pada temperatur diatas 1000 K akan terdisosiasi seluruhnya.

D. F. Davidson [5] juga mengamati oksidasi radikal benzyl oleh radikal hidroperoksida, menyarankan bahwa hal ini adalah merupakan reaksi yang



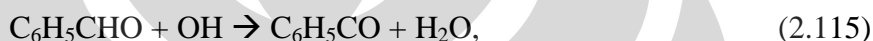
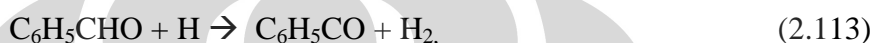
teraktivasi secara kimia yang melibatkan benzylhidroperoksida sebagai produk intermediat :



dan menentukan koefisien laju reaksi yang dibatasi tekanan tinggi untuk reaksi gabungan disosiasi tersebut.

2.7.11 Reaksi-reaksi Benzaldehid

Sebagaimana telah diusulkan oleh Wing Tsang [6], *benzoyl hydrogen* dapat diabstraksi oleh radikal-radikal H, O, OH, HO₂, metal maupun penil :



Dekomposisi termal radikal *benzoyl* merupakan hasil eksperimen:



Sedangkan radikal H dapat menggantikan gugus *formyl* yang menghasilkan benzena:



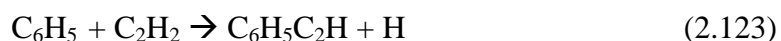
Data hasil percobaan untuk laju reaksi benzaldehyde pada kondisi reaksi pembakaran tidak tersedia, dalam hal ini diadopsi dari hasil estimasi dari model EBG.

2.7.12 Pertumbuhan Massa Molekuler

Pada kondisi reaksi yang melibatkan kandungan kaya bahan bakar, diharapkan reaksi antara molekul bahan bakar dengan dengan produksi hasil oksidasi bisa berlangsung. Walaupun pembentukan jelaga (*soot*) adalah diluar cakupan studi ini, telah banyak percobaan yang melibatkan oksidasi benzena dan toluena pada kondisi kaya kandunga bahan bakar dengan kondisi yang mendekati terbentuknya jelaga, dimana pertumbuhan molekuler berlangsung secara simultan melalui reaksi oksidasi ini.



Radikal penil dapat menggantikan hidrogen pada senyawa tak jenuh (*unsaturated*) yang ada pada kondisi reaksi pembakaran yang berkadar kaya bahan bakar-seperti halnya benzena, etilen atau asetilen, yang secara percobaan telah dilakukan oleh Baskharan [7]:



Hanya reaksi penil dan benzena yang dicakup dalam studi ini, dengan koefisien laju reaksi yang ditentukan dalam studi perhitungannya, termasuk reaksi penggabungan radikal penil-penil :



dan juga termasuk reaksi penggabungan benzyl-benzyl sebagai berikut:



Reaksi-reaksi yang muncul selama proses pembakaran toluena kebanyakan diantaranya adalah produk intermediat yang akan segera dikonsumsi membentuk produk lanjutan lainnya yang mana dengan waktu tinggal dan jumlah reaktan yang mencukupi akan membentuk produk akhir yang lebih stabil berupa CO, CO₂ dan H₂O. Ringkasan beberapa reaksi penting pada proses pembakaran toluena termasuk besaran kontribusinya sebagaimana telah dijabarkan pada Gambar 2.3.

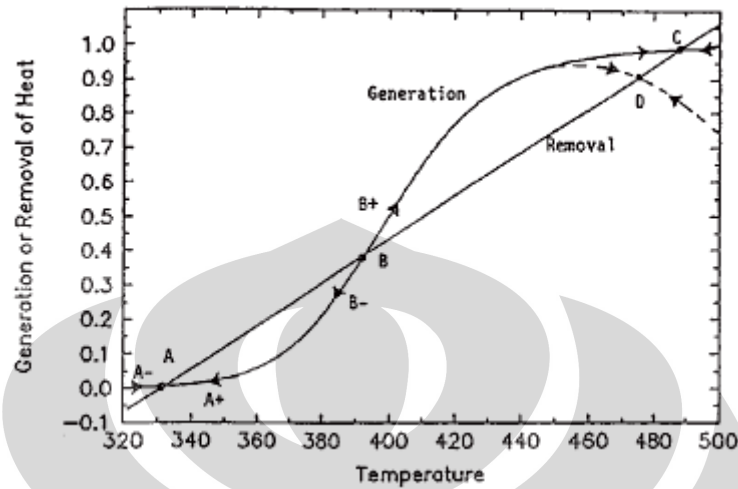
BAB III

KARAKTERISTIK OKSIDASI DAN PEMBAKARAN

Pengaruh faktor fisika dan kimia akan menentukan batasan untuk ignisi dan perambatan nyala (*flame propagation*) pada suatu campuran bahan bakar dan udara. Pada campuran yang dapat terbakar (*inflammable*) akan mampu merambatkan nyala (*propagating*) yang bermula dari sumbernya dengan tanpa adanya sumber ignisi, dalam artian bahwa suatu campuran *inflammable* akan terus merambatkan nyalanya bahkan saat sesudah sumber nyalanya seperti *spark* sudah dimatikan, namun hal ini tidak akan terjadi untuk campuran yang *non-flammable*.

Laju reaksi kimia sangat bergantung pada temperatur awal dari suatu campuran yang *combustible*. Pada saat temperatur suatu campuran dinaikkan perlahan, bisa teramati bahwa hingga pencapaian temperatur tertentu, reaksi belum nampak berlangsung secara signifikan. Tetapi pada saat mencapai temperatur kritis, campuran tersebut akan secara cepat sekali menimbulkan suatu ledakan (*explode*). Hal disebabkan saat temperatur dinaikkan akan menyebabkan energi panas dari reaksi juga meningkat. Pada kasus dimana laju pembangkitan panas lebih kecil dari pada laju penyerapannya (*dissipation*), reaksi kimia akan berlangsung hampir secara isothermal dimana laju reaksinya ditentukan oleh temperatur awal campuran. Lain halnya saat kasus dimana laju pembangkitan panas melebihi laju penyerapannya, dimana pada kondisi seperti ini campuran reaksi ini akan mulai *self-heating* dimana dengan sendirinya akan meningkatkan laju reaksinya. Akumulasi dari pemanasan dan meningkatnya laju reaksi akan mengarah pada terjadinya ledakan (*explosion*). Profil temperatur reaksi terkait dengan laju pembangkitan dan penyerapan panas sebagaimana digambarkan pada Gambar 3.1. Temperatur terendah saat dimana laju pembangkitan panas melebihi *heat loss*-nya yang disebabkan oleh reaksi kimia dirujuk sebagai temperatur ignisi (*ignition temperature*). Dengan kata lain, jika suatu campuran dijaga pada

temperatur cukup tinggi dan juga akan diikuti tekanannya, ignisi terjadi saat berlangsungnya ledakan.

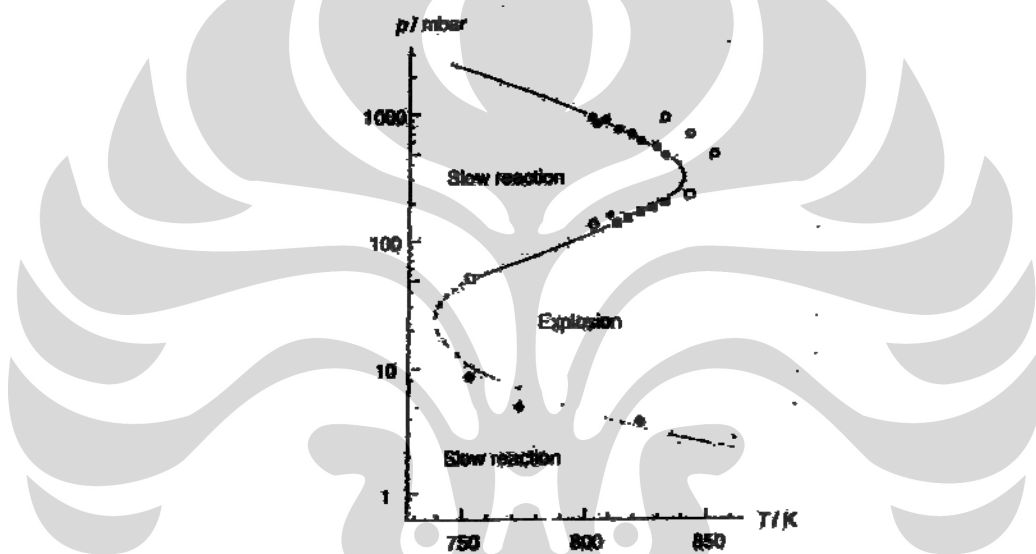


Gambar 3.1 Profil pembangkitan dan penyerapan panas dalam suatu reaksi kimia [8]

Suatu campuran dapat terbakar (*combustible*) dapat terignisi dengan dua cara berbeda. Pertama, keseluruhan dari campuran itu dipanasi secara perlahan sehingga temperaturnya akan naik. Dalam hal ini, pada temperatur tertentu, keseluruhannya campuran akan secara spontan terignisi, yang mengkonsumsi semua reaktannya. Kasus seperti ini dirujuk sebagai *self-ignition*. Untuk metode kedua, suatu porsi kecil dari campuran *combustible* dipanaskan menuju temperatur tinggi oleh suatu sumber panas luar. Dalam hal ini, porsi campuran yang dekat dengan sumber panas akan terbakar dan panas yang dilepaskan dari campuran yang sedang menyala akan menyebar untuk membakar campuran sekelilingnya. Dalam hal ini, nyala yang ada akan mulai menyebarkan dari sumber ignisi dengan kecepatan (*spatial velocity*) tertentu. Sumber panas luar dapat berupa nyala api (dari luar sistem reaksi), benda panas, atau nyala api listrik (*electric spark*). Cara seperti ini dirujuk sebagai ignisi yang dipaksakan (*forced ignition*). Walaupun karakteristik dari dua cara diatas adalah berbeda, namun pada dasarnya adalah sama yaitu keterkaitannya dengan pembangkitan panas dan penyerapannya.

3.1 OTOIGNISI: BATAS IGNISI

Jika suatu campuran hidrogen-oksigen ditempatkan pada sebuah bejana panas, pada tekanan dan temperatur tertentu, maka akan muncul eksplosi spontan setelah *ignition delay time* atau waktu induksi. Pada kondisi lain yang terjadi adalah reaksi lambat. Fenomena ini diperlihatkan pada diagram eksplosi $p-T$ (Gambar 3.2) dimana daerah terjadinya ignisi dan tidak terjadi ignisi dibatasi oleh kurva. Simbol pada Gambar 3.2 menunjukkan hasil percobaan, sedangkan garis menunjukkan hasil simulasi untuk campuran stoikiometri antara hidrogen dan oksigen.



Gambar 3.2. Batas ignisi pada sistem hidrogen-oksigen [9].

Simulasi menunjukkan reaksi fasa gas saja tidak cukup menjelaskan pengukuran batas eksplosi. Suatu sistem hidrogen-oksigen pada 800 K dan tekanan rendah ($p < 5$ mbar) tidak mengalami ignisi. Spesi reaktif (radikal) yang terbentuk pada fasa gas oleh reaksi kimia berdifusi ke dinding bejana membentuk spesi stabil. Pada tekanan rendah, difusi terjadi sangat cepat. Oleh karenanya, ignisi tidak terjadi dan reaksi lambat tetap berlangsung. Ketika tekanan ditingkatkan sampai nilai tertentu (*first ignition limit*), ignisi spontan muncul karena laju difusi radikal ke dinding berkurang dibandingkan laju pembentukan radikal.

Batas eksplosi pertama tergantung pada karakteristik kimia permukaan bejana, karena batas tersebut merupakan hasil proses percabangan rantai pada fasa gas dan pemutusan rantai pada permukaan. Sensitivitas permukaan ini dapat ditunjukkan dengan memperhatikan bahwa pada material dinding yang berbeda (misalnya tembaga, besi, kaca) batas eksplosinya pun akan berbeda pula.

Di atas tekanan 100 mbar (pada temperatur yang sama 800 K) tidak terjadi ignisi. Batas eksplosi kedua ditentukan oleh kompetisi percabangan rantai dan propagasi rantai pada fasa gas. Pada tekanan rendah atom hidrogen bereaksi dengan molekul oksigen sesuai tahap percabangan rantainya berikut [9]:



Produk dari reaksi percabangan rantai, $\dot{\text{O}}$ dan $\dot{\text{O}}\text{H}$, bereaksi secara cepat dengan bahan bakar menghasilkan $\dot{\text{H}}$ yang akan bereaksi pada reaksi percabangan rantai 3.1 menghasilkan radikal yang lebih banyak. Radikal meningkat secara eksponensial yang merupakan dasar dari suatu eksplosi. Reaksi yang berkompetisi dengan reaksi percabangan adalah reaksi *three-body* [9]

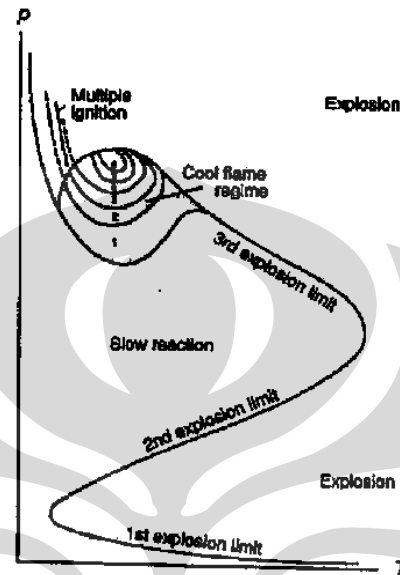


yang menghasilkan radikal hidroperoksida yang sedikit reaktif. Reaksi 3.2 (yang hampir independen terhadap temperatur) merupakan propagasi rantai. Di dalam reaksi dengan *three-body*, peningkatan laju dengan meningkatnya tekanan lebih cepat daripada reaksi kompetisi *two-body*. Pada tekanan tertentu, laju reaksi *three-body* akan melebihi laju reaksi *two-body*. Kompetisi ini merupakan penjelasan untuk batas eksplosi kedua.

Pada tekanan yang lebih tinggi, batas eksplosi kembali dicapai. Batas eksplosi ketiga adalah batas eksplosi thermal. Batas eksplosi ketiga ditentukan oleh kompetisi panas yang dihasilkan oleh reaksi kimia dan panas yang diserap oleh dinding bejana. Panas yang dihasilkan per volume meningkat dengan meningkatnya tekanan sehingga transisi ke arah eksplosi akan tercapai pada tekanan tinggi.

Dari penjelasan di atas, dapat diketahui bahwa batas eksplosi ditunjukkan dengan proses yang tidak linier. Investigasi proses ignisi berperan penting untuk pemahaman yang menyeluruh mengenai proses pembakaran.

Batas ignisi tidak hanya terjadi pada campuran hidrogen-oksigen, namun juga pada semua campuran hidrokarbon-udara. Karena adanya tambahan proses kimia, (seperti pembentukan peroksida) batas eksplosi ini menjadi lebih kompleks, khususnya pada batas eksplosi ketiga. Hal ini ditunjukkan pada Gambar 3.3



Gambar 3.3. Batas ignisi untuk hidrokarbon [9]

Dari Gambar 3.3 dapat diketahui bahwa ignisi terjadi setelah *pulse* emisi cahaya pendek (*multistage ignition*) atau ketika pembakaran terjadi pada temperatur rendah (*cool flames*). Pada keadaan ini, ignisi dihambat oleh reaksi-reaksi kimia, dimana dalam campuran metana-oksigen dihambat oleh reaksi [9]



Reaksi 3.3, 3.4 dan 3.5 merupakan mekanisme percabangan rantai yang menghasilkan ignisi. Akan tetapi, peningkatan temperatur menyebabkan kesetimbangan Reaksi 3.3 berbalik ke kiri dan $\text{CH}_3\dot{\text{O}}_2$ terdekomposisi. Akibatnya, produk yang dihasilkan dari Reaksi 3.4 dan 3.5 juga menjadi sedikit. Kegagalan percabangan pada temperatur tinggi inilah yang disebut *degenerate branching* [9].

Degenerate chain branching dapat mengakibatkan *cool flame* karena laju reaksi menjadi lambat. Campuran hidrokarbon dan oksigen bereaksi sangat lambat

pada temperatur di bawah 200°C. Ketika temperatur meningkat, sejumlah senyawa yang mengandung oksigen mulai terbentuk. Ketika temperatur mulai meningkat lebih jauh, CO dan H₂O mulai mendominasi produk yang terbentuk, sementara H₂O₂ (hidrogen peroksida), CH₂O (formaldehida), CO₂ dan senyawa lainnya mulai muncul. Pada 300-400°C, cahaya redup mulai muncul, dan cahaya ini mungkin diikuti oleh satu atau lebih cahaya biru yang mampu melintasi tempat reaksi. Keluaran cahaya ini disebut *cool flame* dan dapat diikuti oleh ledakan [18].

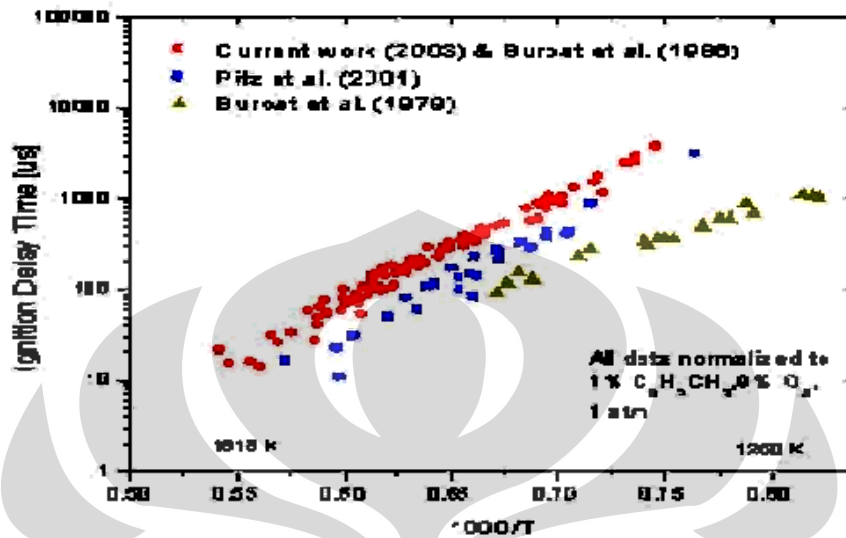
3.2 **IGNITION DELAY TIME (WAKTU PENUNDAAN IGNISI)**

Ignition delay merupakan karakteristik eksplosif rantai-radikal (reaksi kimia yang ditentukan oleh mekanisme percabangan rantai). Selama periode *ignition delay* populasi kolam radikal meningkat secara eksponensial. Meskipun demikian, jumlah bahan bakar yang dikonsumsi dan bahkan jumlah energi yang dibebaskan masih sangat kecil untuk dideteksi. Oleh karena itu, reaksi kimia penting (percabangan rantai, pembentukan radikal) terjadi selama waktu induksi dimana temperatur mendekati nilai konstan.

Akhirnya, populasi kolam radikal menjadi cukup banyak untuk mengkonsumsi fraksi bahan bakar dengan jumlah yang cukup signifikan dan ignisi cepat dapat terjadi. Definisi yang tepat untuk waktu induksi tergantung pada kriteria yang digunakan (konsumsi bahan bakar, pembentukan CO, pembentukan OH, peningkatan tekanan dalam suatu bejana bervolume konstan, peningkatan temperatur dalam suatu bejana adiabatik, dan lain-lain).

Karena reaksi elementer dipengaruhi oleh temperatur, maka *ignition delay time* sangat tergantung pada temperatur. Berdasarkan data dari beberapa percobaan yang telah dilakukan oleh Pitz dan Burcat untuk sistem pembakaran toluena pada rentang temperature 1250 K – 1818 K, didapatkan suatu pola teratur secara logaritmik antara *ignition delay* yang berbanding terbalik dengan temperatur. Hal ini dapat dilihat pada Gambar 3.4. Percobaan dilakukan dengan menggunakan toluena dengan konsentrasi 1% (vol.), oksigen 9 % (vol.) dan sisanya berupa gas inert argon 90 % (vol.) yang mana kandungan dari bahan bakar ini setara dengan *equivalence ratio* (ϕ) = 1,0. Campuran dengan besaran rasio tersebut dirujuk sebagai campuran stoikiometrik. Dari ketiga percobaan yang telah

dilakukan, percobaan yang dilakukan oleh Burcat menunjukkan ketelitian dan sebaran yang lebih baik.



Gambar 3.4 *Ignition delay time* terukur dari beberapa peneliti pada campuran hidrokarbon-udara [5]

Korelasi sebenarnya dari Gambar 3.4 adalah bahwa *ignition delay time* tergantung pada temperatur secara eksponensial [9],

$$\tau = A \exp(B/T)$$

dimana temperatur berpengaruh secara langsung pada reaksi elementer selama periode induksi [9].

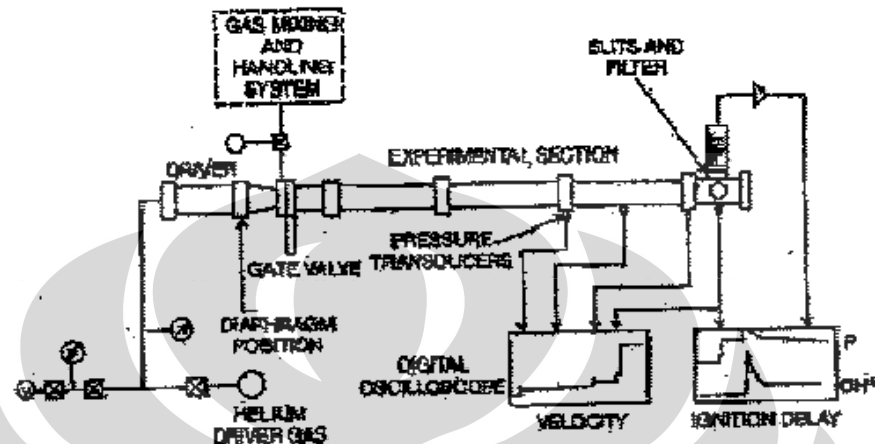
3.3 PERALATAN MODEL PEMBAKARAN

Pada penelitian oksidasi dan pembakaran bahan bakar digunakan beberapa peralatan yang dapat mengukur *ignition delay times* dan profil konsentrasi produk bahan bakar yang diuji. Peralatan tersebut antara lain *shock tube*, *flow reactor* dan *jet stirred reactor*.

3.3.1 Shock Tube

Shock tube adalah sebuah alat yang digunakan untuk mempelajari reaksi pembakaran pada fasa gas. *Shock tube* juga dapat digunakan untuk mempelajari

aliran aerodinamis pada rentang temperatur dan tekanan yang lebar. *Shock tube* sederhana merupakan sebuah tabung logam yang memisahkan gas pada tekanan rendah dan tinggi dengan sebuah diafragma. Peralatan *shock tube* diperlihatkan pada Gambar 3.5.



Gambar 3.5 Peralatan *shock tube* [7]

Gas bertekanan rendah pada bagian yang digerakkan menjadi gelombang kejut (*shock wave*). Bagian penggerak mengandung gas bertekanan tinggi (gas penggerak biasanya berupa helium atau hidrogen). Gas-gas ini (yang tidak perlu memiliki komposisi kimia yang sama) dipompa menuju bagian-bagian tabung atau dengan menggunakan pipa gas bertekanan (jika tekanan yang diinginkan kurang dari 1 atmosfer). Gas dipompa keluar dari bagian tabung hingga tekanan yang diinginkan tercapai. Diafragma yang berada di antara bagian tabung harus cukup kuat untuk menahan perbedaan tekanan mula-mula. Diafragma juga harus membuka dengan baik untuk memberikan hasil pengujian yang baik.

Permulaan pembakaran menghasilkan peningkatan tekanan secara tiba-tiba sehingga memecahkan diafragma. Metode ini merupakan salah satu metode pemecahan diafragma yang digunakan pada campuran gas yang dapat terbakar dalam *driver*. Setelah diafragma pecah, suatu gelombang bertekanan melewati tabung menuju gas yang akan digerakkan, kemudian secara cepat membentuk suatu *shock front*, yang dikenal sebagai *incident shock wave*. Gelombang kejut ini meningkatkan temperatur dan tekanan gas yang akan digerakkan dan menginduksi suatu aliran yang bersamaan dengan gelombang kejut (tetapi pada kecepatan yang lebih rendah dari gelombang kejut itu sendiri). Setiap kejutan yang melintas

melalui tiap bagian volume akan meningkatkan temperatur. Temperatur akhir sistem biasanya sekitar 10^3 - 10^4 K. Proses pemanasan terjadi dalam waktu yang sangat cepat, yaitu selama $1 \mu\text{s}$ [8].

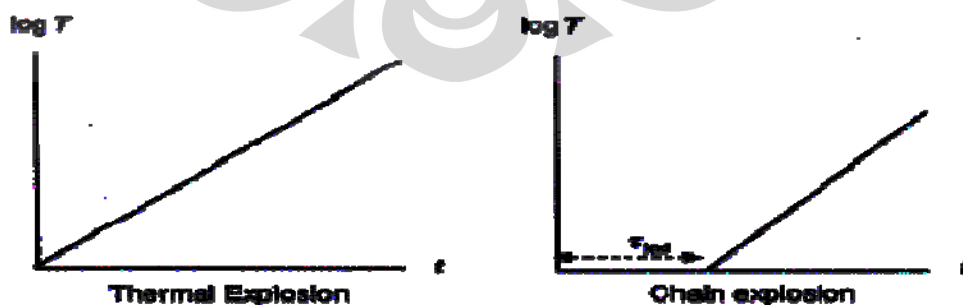
Ketika *incident shock wave* mencapai ujung *shock tube*, gelombang ini dipantulkan kembali ke dalam gas yang sudah dipanaskan, dan menghasilkan peningkatan yang lebih pada temperatur, tekanan, dan densitas gas. Gelombang ini secara efektif menghasilkan daerah reaksi temperatur dan tekanan tinggi [10].

Baik *incident wave* maupun gelombang terpantulkan dapat digunakan untuk menciptakan kondisi pengujian yang sesuai untuk penelitian otognisi. Teknik kejutan tepantulkan memiliki tiga keuntungan dibandingkan dengan *incident shock*, yaitu

1. dapat menghasilkan temperatur yang lebih tinggi
2. dapat menghilangkan ignisi sementara yang disebabkan oleh pecahnya difragma
3. dapat menciptakan gas yang cukup tenang setelah pantulan gelombang.

Teknik *incident shock* memiliki keterbatasan secara fisik. Kejutan yang cukup kuat untuk mengignisi campuran bahan bakar dapat dipercepat dengan gradien densitas yang besar dibelakang gelombang. Peristiwa ini meningkatkan kekuatan kejutan di sepanjang tabung dan dapat mendorong terjadinya detonasi [11].

Pada proses ignisi termal, peningkatan temperatur terjadi sekali. Pada campuran hidrogen atau hidrokarbon-udara, dapat diketahui bahwa peningkatan temperatur dan eksplosi terjadi setelah periode waktu tertentu (*ignition delay time*), yang dapat dilihat pada Gambar 3.6.



Gambar 3.6 Perilaku waktu eksplosi termal (kiri) dan eksplosi percabangan rantai (kanan) dalam suatu sistem adiabatik [9]

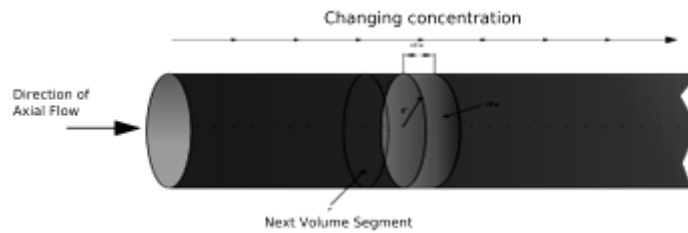
Selama periode penundaan ignisi, populasi kumpulan radikal meningkat pada laju eksponensial[12]. Namun banyaknya bahan bakar yang dikonsumsi dan jumlah energi yang dibebaskan sangat kecil untuk dideteksi. Dengan demikian, reaksi kimia penting (percabangan rantai, pembentukan radikal) terjadi selama waktu induksi, yaitu saat temperatur mendekati konstan. Akhirnya, kumpulan radikal menjadi cukup besar untuk mengkonsumsi fraksi bahan bakar secara signifikan dan ignisi cepat akan terjadi [13].

Keakuratan data *shock tube* tergantung pada pengukuran kecepatan kejutan yang tepat. Hal ini biasanya ditentukan dengan mengukur waktu yang diperlukan gelombang kejut untuk melewati empat titik atau lebih, yang dipisahkan dengan jarak tertentu sepanjang tabung, dan merata-ratakan nilainya. *Shock front* yang datang dideteksi oleh *pressure transducers* dan interval waktu direkam oleh suatu pengukur waktu elektrik [13].

3.3.2 Plug Flow Reactor (PFR)

Plug flow reactor digunakan sebagai media untuk menjalankan reaksi kimia pada sistem aliran kontinyu. Fluida yang mengalir melalui PFR dapat dimodelkan sebagai aliran koheren “plug” yang tipis tak terbatas melewati reaktor. Plug adalah komposisi seragam yang mengalir secara aksial pada reaktor. Perbedaan komposisi dapat menyebabkan ketidaklancaran aliran plug. Asumsi yang diperlukan adalah ketika plug mengalir pada suatu PFR, fluida tercampur secara sempurna pada arah radial.pada aliran tersebut, *residence time* (τ) dari plug merupakan suatu fungsi posisi plug di dalam reaktor[15]. Suatu *plug flow reactor* ideal memiliki *residence time* yang tetap. Fluida (plug) yang memasuki reaktor pada waktu t akan keluar dari reaktor pada waktu $t + \tau$, τ adalah *residence time* dari reaktor. Fungsi distribusi *residence time* adalah fungsi dirac delta pada τ [22].

Model reaktor *Plug Flow* (PFR) digunakan untuk memodelkan perubahan kimia senyawa dalam suatu reaksi pembakaran ketika melewati sistem yang menyerupai pipa. Skema *plug flow reactor* dapat dilihat pada Gambar 3.7. Kelebihan reaktor *plug flow* dibandingkan dengan model reaktor sebelumnya adalah akan dihasilkannya konversi reaksi yang lebih tinggi dengan waktu tinggal yang sama.



Gambar 3.7 Skema *plug flow reactor* (PFR) [15]

Plug flow reactor memiliki suatu unit konversi volumetrik yang tinggi, dapat dijalankan untuk periode waktu yang panjang, dan memiliki kemampuan transfer panas yang baik karena diameter dapat diubah dengan menggunakan reaktor paralel. Kekurangan *plug flow reaktor* adalah temperatur yang sulit dikontrol dan dapat menghasilkan gradien temperatur yang tidak diinginkan [15].

3.3.3 *Perfectly Stirred Reactor* (PSR)

Pada *perfectly stirred reactor* (PSR), umpan secara tradisional dimasukkan melalui daerah *impeller* untuk menghasilkan turbulensi tinggi, meningkatkan laju pencampuran, sehingga mengurangi keterbatasan dalam pencampuran. Namun terdapat kesulitan untuk memasukkan umpan ke bawah permukaan campuran dalam *perfectly stirred reactor* (PSR) dengan *dip tube*, sehingga cara yang digunakan adalah memasukkan umpan melalui permukaan campuran. Salah satu cara alternatif memasukkan umpan ke dalam *perfectly stirred reactor* (PSR) adalah melalui permukaan fluida dengan menggunakan jet berkecepatan tinggi untuk meningkatkan kualitas pencampuran. Hasil percobaan menunjukkan bahwa dengan waktu masukan umpan yang berkurang, terjadi peningkatan pembentukan produk samping dan kualitas produk. Turbulensi jet sempurna memerlukan waktu masukan umpan yang sangat pendek, kecepatan aliran umpan yang sangat tinggi hingga mencapai *impeller*, dan diameter pipa masukan yang sangat kecil [16].

Perfectly stirred reactor (PSR) skala laboratorium telah digunakan untuk mempelajari proses kinetika kimia yang mempengaruhi pembakar berintensitas tinggi sejak 1950. Sebelumnya, reaktor ini digunakan untuk mempelajari masalah matinya pembakar turbojet di tempat yang sangat tinggi. Kemudian, reaktor tersebut digunakan untuk mempelajari laju global pembakaran hidrokarbon.

3.3 KNOCK PADA MESIN

Gas tidak terbakar yang terakhir tersisa disebut *end-gas*. Jika tekanan dan temperatur *end-gas* tidak terlalu tinggi, *end-gas* akan terbakar oleh nyala bagian depan sebelum *knock* muncul. *End-gas* pertama kali terbakar pada daerah dengan peningkatan temperatur lokal (*hot-spots*), yang disebabkan oleh (walaupun *end-gas* hampir homogen) hadirnya sedikit fluktuasi temperatur dan tekanan. Penyebab fluktuasi ini belum diketahui secara pasti. Ignisi dari *hot-spot* menyebabkan perambatan nyala induksi-tekanan atau pembentukan gelombang detonasi yang menyebabkan terjadinya pembakaran seluruh *end-gas* dengan sangat cepat [9].

3.3.1 Oksidasi pada Temperatur Tinggi

Reaksi percabangan rantai [9]



yang mendominasi pembakaran pada temperatur tinggi berlangsung sangat lambat (karena energi aktivasinya besar) untuk menjelaskan otoignisi pada temperatur di bawah 1200 K. Analisis sensitivitas dan jalur reaksi menunjukkan bahwa percabangan rantai yang berpengaruh terhadap otoignisi setelah reaksi inisiasi seperti [9]



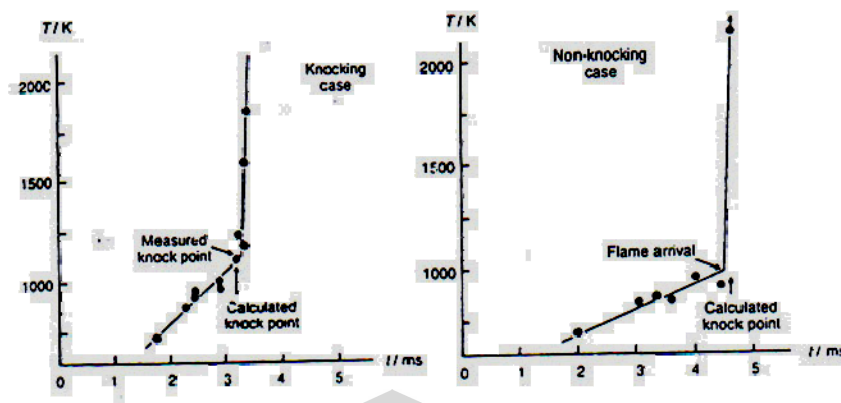
ditunjukkan oleh Reaksi 3.8 dan 3.9 [9],



dimana $\dot{\text{R}}$ adalah radikal hidrokarbon. Radikal $\dot{\text{O}}\text{H}$ dapat menghasilkan kembali $\text{H}\dot{\text{O}}_2$, melalui Reaksi 3.10 dan 3.11 [9]



Percabangan melalui radikal $\text{H}\dot{\text{O}}_2$ ini menjelaskan proses *knock* dalam mesin uji pada temperatur sekitar 1100 K.

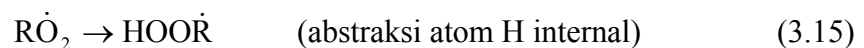


Gambar 3.8 Otoignisi pada siklus mesin yang mengalami *knock* dan mengalami *knock* [9].

Gambar 3.8 menunjukkan hasil simulasi dan percobaan untuk siklus mesin yang mengalami *knock* dan yang tidak mengalami *knock*. *Ignition delay time* dihitung berdasarkan pada pengukuran tekanan yang dihubungkan dengan perhitungan temperatur. Pada kasus *knocking*, perhitungan waktu ignisi sesuai dengan waktu ignisi dari hasil percobaan. Pada kasus tanpa *knocking* waktu otoignisi lebih besar dari pada waktu timbulnya nyala. Oleh karena itu, pembakaran umumnya sudah sempurna sebelum otoignisi terjadi. Akan tetapi, hasil ini tidaklah umum [9].

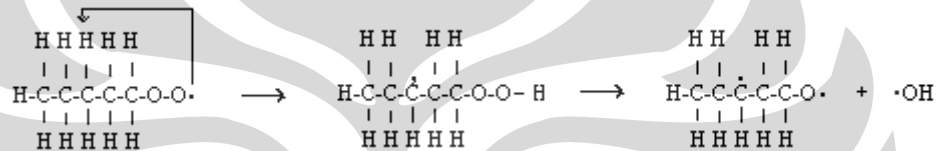
3.3.2 Oksidasi pada Temperatur Rendah

Panas *end-gas* yang hilang pada mesin produksi biasanya lebih tinggi dibandingkan pada mesin uji. Ketika hal tersebut terjadi, otoignisi muncul pada temperatur lebih rendah (800-900 K). Sebagai contoh, dekomposisi H_2O_2 sangat lambat pada temperatur 800-900 K, dan mekanisme percabangan rantai lain (bahan bakar spesifik akan lebih rumit) ditentukan oleh proses ignisi [9]:



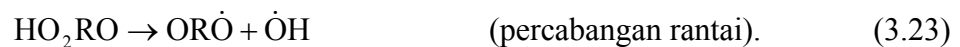
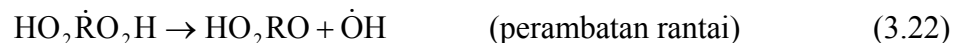
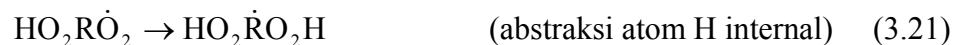
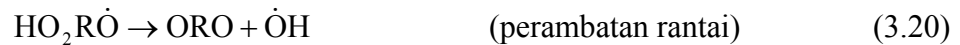
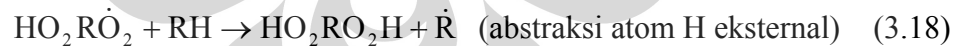
Pada tahap pertama, radikal hidrokarbon (\dot{R}) bereaksi dengan oksigen dan membentuk radikal peroksi ($\dot{R}O_2$). Radikal ini dapat mengabstrak atom hidrogen

dan membentuk senyawa hidroperoksi (ROOH). Setelah abstraksi atom hidrogen eksternal (reaksi dengan molekul lainnya), senyawa hidroperoksi terdekomposisi menjadi radikal oksi ($\dot{R}O$) dan $\dot{O}H$. Sebagai alternatif, abstraksi hidrogen secara internal (abstraksi suatu atom hidrogen dari molekulnya sendiri) dapat menggantikan abstraksi hidrogen eksternal, jika \dot{R} dapat membentuk intermediet cincin 5-, 6- atau 7- yang relatif stabil, dimana terdapat dua atom oksigen dan transfer atom H pada pembentukan cincin (lihat Gambar 3.9). Kemudian, radikal $\dot{R}O_2H$ (valensi bebas berada pada posisi dimana atom hidrogen telah diabstrak) bereaksi membentuk senyawa yang tidak memiliki valensi bebas (aldehida, keton) dan $\dot{O}H$, menurut perambatan rantai.



Gambar 3.9 Abstraksi atom hidrogen internal pada radikal heptil peroksi melalui struktur intermediet cincin 6- [9].

Namun, abstraksi atom H eksternal jauh lebih lambat dibandingkan abstraksi internal, dan mekanismenya tidak dapat menjelaskan suatu percabangan rantai yang efisien dan otoignisi. Suatu mekanisme yang menjelaskan perilaku ignisi diperoleh jika adisi O_2 diulang pada radikal $\dot{R}O_2H$, yang dibentuk setelah adisi O_2 pertama [9]:

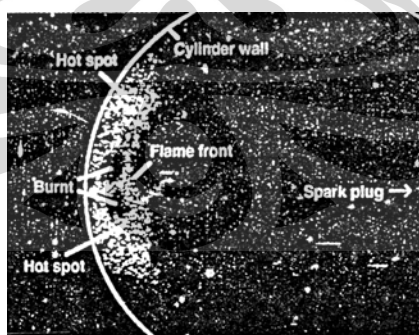


Mekanisme ini dapat menjelaskan ignisi dua tahap dan koefisien temperatur negatif dari *ignition delay time*. Prekursor percabangan rantai, yang terbentuk oleh adisi oksigen, terdekomposisi balik menuju reaktan pada temperatur tinggi karena ketidakstabilannya (*degenerate chain branching*).

Pada ignisi dua tahap, campuran yang dapat terbakar mengalami kenaikan temperatur yang kecil yang menghentikan percabangan rantai. Setelah *ignition delay time* yang cukup lama, ignisi kedua dan pembakaran lengkap yang ditentukan oleh oksidasi pada temperatur tinggi akan muncul. Daerah koefisien temperatur negatif dikarakterisasi oleh fakta bahwa peningkatan temperatur menyebabkan peningkatan *ignition delay time*, yang berlawanan dengan hal umum bahwa kenaikan temperatur akan menurunkan *ignition delay time* [9].

3.3.3 Kerusakan oleh *Knock*

Ignisi titik panas (*hot-spot*) pada *end-gas* yang tidak terbakar terjadi terlalu cepat, sehingga tekanan sulit mencapai kesetimbangan. Titik panas terbentuk karena ketidakseragaman temperatur atau konsentrasi seperti yang terlihat pada Gambar 3.10. Gelombang tekanan yang terbentuk menyebabkan pembentukan gelombang detonasi. Perambatan yang cepat dari gelombang detonasi menyebabkan ignisi yang hampir serentak pada *end-gas*. Jika gelombang tekanan menabrak dinding silinder, maka kerusakan oleh *knock* akan terjadi karena pelepasan logam dari dinding atau piston [9].



Gambar 3.10 Pembentukan *hot-spots* di *end-gas* pada mesin otto [9].

BAB IV

METODOLOGI PENELITIAN

4.1 RANCANGAN PENELITIAN

Tahapan dalam penelitian ini dapat dibagi kedalam lima tahap sebagai berikut:

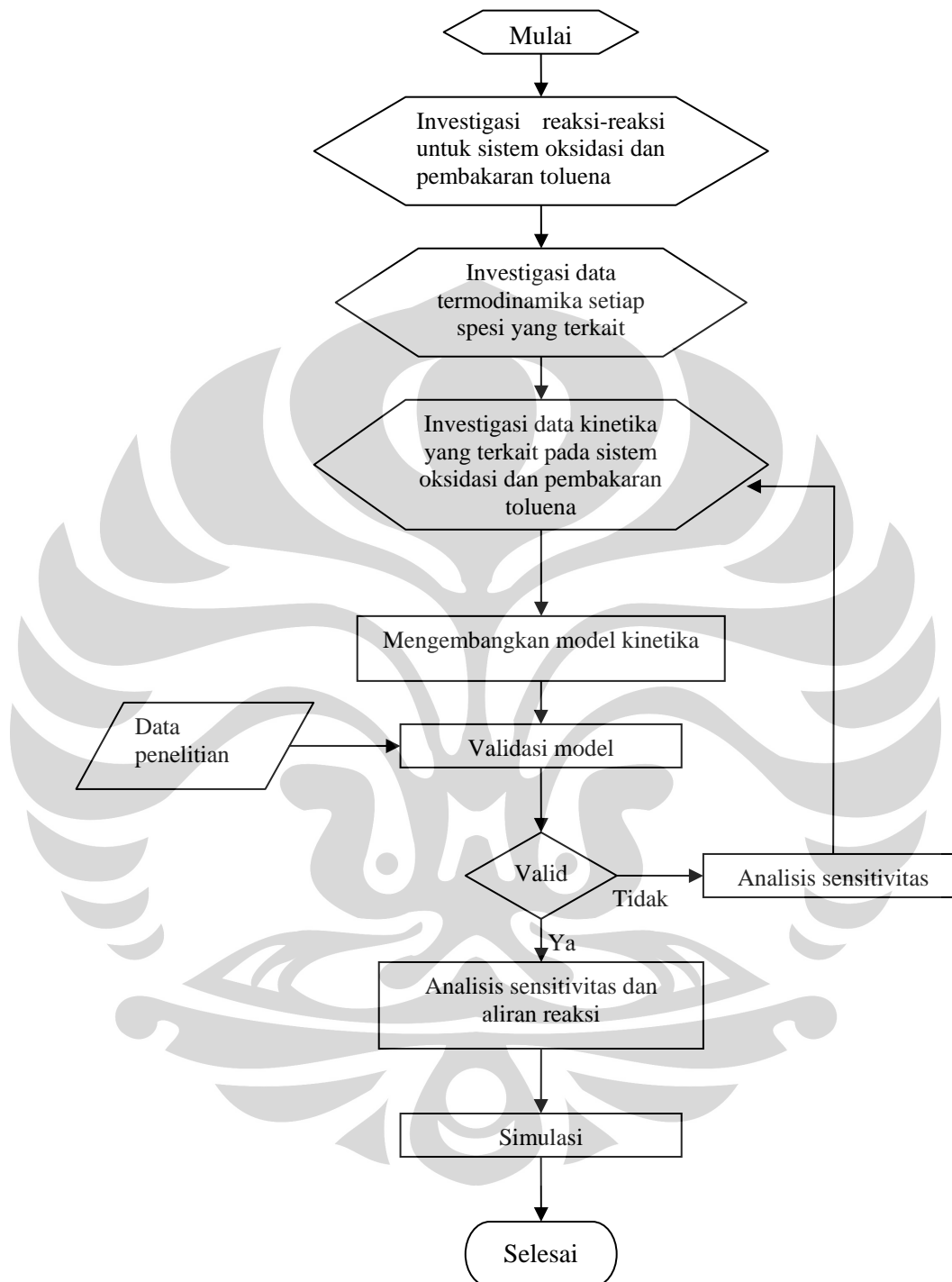
1. Investigasi reaksi-reaksi elementer, data kinetika terkait dan data termodinamika spesi yang terlibat untuk sistem oksidasi dan pembakaran toluena.

Tahap ini dilakukan dengan mengumpulkan literatur tentang reaksi-reaksi elementer yang terjadi pada oksidasi dan pembakaran toluena dan menemukan keterkaitan di antara reaksi-reaksi tersebut. Selanjutnya mengumpulkan data kinetika dari reaksi-reaksi tersebut dan data termodinamika spesi yang terlibat.

2. Mengembangkan model kinetika
Menyusun mekanisme reaksi oksidasi dan pembakaran toluena sesuai dengan format Chemkin.
3. Validasi model
Membandingkan hasil perhitungan dengan data penelitian.
4. Analisis sensitivitas dan aliran reaksi
5. Simulasi

Mensimulasikan reaksi oksidasi dan pembakaran toluena dengan memvariasikan kondisi operasi seperti tekanan, temperatur, rasio ekivalensi (ϕ) dan pengenceran dengan senyawa nitrogen (N_2) dan argon (Ar) yang bersifat inert.

Kelima tahapan di atas beserta alurnya dapat dilihat pada Gambar 4.1.



Gambar 4.1. Skema Penelitian



4.2 RINCIAN KEGIATAN PENELITIAN

4.2.1 Investigasi Reaksi Elementer, Data Kinetika Terkait dan Data Termodinamika Spesi yang Terlibat Untuk Sistem Oksidasi dan Pembakaran Toluena

Tahap ini dilakukan dengan mengumpulkan literatur tentang reaksi-reaksi elementer yang terjadi pada oksidasi toluena dan menemukan keterkaitan diantara reaksi-reaksi tersebut serta mengumpulkan data kinetika dari reaksi-reaksi tersebut. Data kinetika merupakan koefisien laju reaksi (k) dari persamaan Arrhenius yang terdiri dari faktor pre-exponensial, A , eksponen temperatur, b , dan energi aktivasi, E_a .

Kemudian data elemen, spesi, dan mekanisme reaksi digunakan sebagai masukan *Gas-Phase Kinetics* untuk salah satu utilitas *Chem* dalam *software* Chemkin. Format penulisannya dapat dilihat pada Gambar 4.2.

```
ELEMENTS  H O C N AR
END
speci es
H          ! hydrogen radi cal
H2         ! hydrogen
O          ! oxygen radi cal
O2         ! oxygen
N2         ! ni trogen
AR         ! argon
OH         ! hydroxy radi cal
H2O       ! water
H2O2      ! hydroperoxy radi cal
H2O2      ! hydrogen peroxi de
C         ! carbon
CO        ! carbonmonoxi de
CO2       ! carbondi oxi de
CH        ! methyl i dyne
CH2       ! methyl ene radi cal (tri pl et)
CH2*     ! methyl ene radi cal (si ngl et)
CH3       ! methyl radi cal
CH4       ! methane
CH3O      ! methoxy radi cal
CH2OH     ! hydroxymethyl radi cal
CH3OH     ! methyl al cohol
HCO       ! formyl radi cal
CH2O      ! formal dehyde
C2H       ! ethynyl radi cal
C2H2      ! ethyne
C2H3      ! vi nyl radi cal
C2H4      ! ethene
```



C ₂ H ₅	! ethyl radi cal
C ₂ H ₆	! ethane
C ₂ O	! di carbon monoxi de
HCCO	! ketyl radi cal
H ₂ CC	! vi nyl i dene
HCCOH	! ethynol
C ₃ H ₈	! propane
C ₂ H ₃ CHO	! 2-propenal
C ₄ H	! butadi ynyl radi cal
C ₄ H ₂	! butadi yne
n-C ₄ H ₃	! 1-buten-3-yne-1-yl radi cal
i -C ₄ H ₃	! 1-buten-3-yne-2-yl radi cal
C ₄ H ₄	! 1-buten-3-yne
i -C ₄ H ₅	! 1,3-butadi en-2-yl radi cal
n-C ₄ H ₅	! 1,3-butadi en-1-yl radi cal
c-C ₄ H ₅	! cycl obutenyl radi cal
C ₄ H ₆ -1,2	! 1,2-butadi ene
C ₄ H ₆ -1,3	! 1,3-butadi ene
C ₄ H ₇	! 1-buten-3-yl radi cal
C ₄ H ₈ -1	! 1-butene
H ₂ C ₄ O	! 1,2-epoxy-1-buten-3-yne
l -C ₅ H ₆	! 1,2,4-pentatri ene
l -C ₅ H ₇	! 1,4-pentadi en-3-yl radi cal
C ₅ H ₅	! cycl opentadi enyl radi cal
C ₅ H ₆	! 1,3-cycl opentadi ene
C ₅ H ₄ O	! 2,4-cycl opentadi en-1-one
bi -C ₅ H ₄ O	! bi cycl o[2.1.0]pent-2-ene-5-one
C ₅ H ₄ OH	! cycl opentadi enol yl radi cal
C ₅ H ₅ OH	! cycl opentadi enol
C ₅ H ₅ O-1,3	! 1,3-cycl opentadi en-1-oxy radi cal
C ₅ H ₅ O-2,4	! 2,4-cycl opentadi en-1-oxy radi cal
C ₆ H ₂	! hexatri yne
C ₆ H ₃	! hexa-1,5-di yne-3-ene-3-yl radi cal
l -C ₆ H ₄	! hexa-1,5-di yne-3-ene
c-C ₆ H ₄	! benzyne
C ₆ H ₅	! phenyl radi cal
C ₆ H ₆	! benzene
C ₆ H ₅ CH ₂	! benzyl radi cal
C ₆ H ₅ CH ₃	! tol uene
C ₆ H ₅ CHO	! benzal dehyde
C ₆ H ₅ CO	! benzoyl radi cal
bi -C ₆ H ₅ CH ₂	! bi benzyl
C ₆ H ₅ CH ₂ OH	! benzyl al cohol
C ₆ H ₅ O	! phenoxy radi cal
C ₆ H ₅ OH	! phenol
C ₆ H ₄ O ₂	! benzoqui none
OC ₆ H ₄ CH ₃	! cresoxy radi cal (p)
HOC ₆ H ₄ CH ₃	! cresol
C ₆ H ₅ C ₂ H ₅	! ethyl benzene
C ₆ H ₅ C ₂ H ₃	! vi nyl benzene
P ₂	! bi phenyl



REACTIONS

H + O2 = O + OH	8.300E+13	0	14413	!	[1]
O + H2 = H + OH	5.000E+04	2.67	6290	!	[1]
OH + H2 = H + H2O	2.160E+08	1.51	3430	!	[1]
OH + OH = O + H2O	3.570E+04	2.4	-2110	!	[1]
H + H + M = H2 + M	1.000E+18	-1	0	!	[1]
AR	/0.63/				
CO2	/0.00/				
H2O	/0.00/				
H2	/0.00/				
CH4	/2.00/				
C2H2	/3.00/				
C2H4	/3.00/				
C2H6	/3.00/				
H + H + H2 = H2 + H2	9.000E+16	-0.6	0	!	[1]
H + H + H2O = H2 + H2O	6.000E+19	-1.25	0	!	[1]
H + H + CO2 = H2 + CO2	5.500E+20	-2	0	!	[1]
H + OH + M = H2O + M	2.200E+22	-2	0	!	[1]
AR	/0.38/				
H2O	/3.65/				
H2	/0.73/				
CH4	/2.00/				
C2H2	/3.00/				
C2H4	/3.00/				
C2H6	/3.00/				
O + H + M = OH + M	5.000E+17	-1	0	!	[1]
AR	/0.70/				
CO	/1.50/				
CO2	/2.00/				
H2O	/6.00/				
H2	/2.00/				
CH4	/2.00/				
C2H2	/3.00/				
C2H4	/3.00/				
C2H6	/3.00/				
O + O + M = O2 + M	1.200E+17	-1	0	!	[1]
AR	/0.83/				
CO	/1.80/				
CO2	/3.60/				
H2O	/15.4/				
H2	/2.40/				
CH4	/2.00/				
C2H2	/3.00/				
C2H4	/3.00/				
C2H6	/3.00/				
H + O2 + M = HO2 + M	2.800E+18	-0.86	0	!	[1]
AR	/0.00/				
N2	/0.00/				
O2	/0.00/				
CO	/0.80/				
CO2	/1.50/				
H2O	/0.00/				
C2H2	/3.00/				
C2H4	/3.00/				
C2H6	/1.50/				



```
H + O2 + O2 = HO2 + O2      3.000E+20  -1.72    0    ! [1]
H + O2 + H2O = HO2 + H2O    1.652E+19  -0.76    0    ! [2]
H + O2 + N2 = HO2 + N2      2.600E+19  -1.24    0    ! [3]
H + O2 + AR = HO2 + AR      7.000E+17  -0.8     0    ! [1]
OH + OH (+M) = H2O2 (+M)    7.400E+13  -0.37    0    ! [1]

LOW /2.300E+18  -0.9  -1700/
TROE /0.7346  94.000 1756.0 5182.0/
AR /0.7/
CO /1.5/
CO2 /2.0/
H2O /6.0/
H2 /2.0/
CH4 /2.0/
C2H2 /3.0/
C2H4 /3.0/
C2H6 /3.0/

END
```

Gambar 4.2 Contoh format penulisan data kinetika

Dalam setiap baris penulisan data reaksi diatas, terdiri dari 2 hal utama yaitu pertama berupa deskripsi simbolik reaksi (bagian kiri) dan kedua berupa koefisien laju Arrhenius (bagian kanan). Pada deskripsi simbolik reaksi, tanda sama dengan (=) menunjukkan bahwa reaksi adalah reversibel, huruf M menunjukkan suatu reaktan atau produk yang berperan sebagai *third body*. Pada bagian kedua yang menunjukkan koefisien laju Arrhenius, urutannya adalah sebagai berikut (dimulai dari kiri) faktor pre-exponensial, A , eksponen temperatur, b , dan energi aktivasi, E_a . Efisiensi *third body* untuk beberapa spesi ditetapkan pada baris berikutnya setelah penulisan reaksi yang mengandung *third body*, M [24]. Persamaan laju Arrhenius dapat dilihat pada Persamaan 2.19 untuk memperoleh koefisien laju (k). Suatu laju reaksi terkadang lebih mudah diukur pada satu arah (misalnya laju reaksi ke kanan, k_2) daripada arah lainnya. Oleh karena itu, untuk menghitung koefisien laju arah lainnya (misalnya laju ke kiri, k_{-2}) dengan menggunakan nilai terukur k_2 dan konstanta kesetimbangan K_c pada Persamaan 2.36. Kemudian menggunakan dengan Persamaan 2.36-2.40 akan diperoleh nilai k_{-2} (koefisien laju ke kiri).

Selanjutnya, format penulisan masukan data termodinamika sebagai masukan *properties database* di software Chemkin dapat dilihat pada Gambar 4.3.

```

THERMO
300.000 1000.000 5000.000
N2      N 2      G      300      5000      1000      1
0.29266400E+01 0.14879768E-02-0.56847603E-06 0.10097038E-09-0.67533509E-14
-0.92279773E+03 0.59805279E+01 0.32986770E+01 0.14082404E-02-0.39632218E-05
0.56415148E-08-0.24448540E-11-0.10208999E+04 0.39503720E+01
AR      AR 2      G      300      5000      1000      1
0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
-0.74537500E+03 0.43660002E+01 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00
0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.74537500E+03 0.43660002E+01
O      O 1      G      200      3500      1000      1
0.25694208E+01-0.85974112E-04 0.41948457E-07-0.10017780E-10 0.12283369E-14
0.29217578E+05 0.47843385E+01 0.31682670E+01-0.32793188E-02 0.66430639E-05
-0.61280661E-08 0.21126597E-11 0.29122260E+05 0.20519335E+01
O2     O 2      G      200      3500      1000      1
0.32825379E+01 0.14830875E-02-0.75796669E-06 0.20947055E-09-0.21671780E-13
-0.10884578E+04 0.54532313E+01 0.37824564E+01-0.29967341E-02 0.98473020E-05
-0.96812949E-08 0.32437284E-11-0.10639436E+04 0.36576757E+01
H      H 1      G      200      3500      1000      1
0.25000000E+01-0.23084297E-10 0.16156195E-13-0.47351524E-17 0.49819734E-21
0.25473660E+05-0.44668290E+00 0.25000000E+01 0.70533282E-12-0.19959196E-14
0.23008163E-17-0.92773233E-21 0.25473660E+05-0.44668284E+00
H2     H 2      G      200      3500      1000      1
0.33372791E+01-0.49402472E-04 0.49945680E-06-0.17956639E-09 0.20025538E-13
-0.95015894E+03-0.32050233E+01 0.23443310E+01 0.79805208E-02-0.19478151E-04
0.20157209E-07-0.73761179E-11-0.91793518E+03 0.68301022E+00
OH     O 1H 1      G      200      3500      1000      1
0.30928876E+01 0.54842973E-03 0.12650523E-06-0.87946157E-10 0.11741238E-13
0.38586570E+04 0.44766960E+01 0.39920154E+01-0.24013175E-02 0.46179384E-05
-0.38811332E-08 0.13641147E-11 0.36150806E+04-0.10392546E+00
H2O    O 1H 2      G      200      3500      1000      1
0.30339925E+01 0.21769181E-02-0.16407252E-06-0.97041986E-10 0.16820099E-13
-0.30004297E+05 0.49667702E+01 0.41986403E+01-0.20364341E-02 0.65204022E-05
-0.54879705E-08 0.17719782E-11-0.30293727E+05-0.84903222E+00
HO2    O 2H 1      G      200      3500      1000      1
0.40172110E+01 0.22398201E-02-0.63365815E-06 0.11424637E-09-0.10790853E-13
0.11185671E+03 0.37851021E+01 0.43017979E+01-0.47491207E-02 0.21158288E-04
-0.24276389E-07 0.92922510E-11 0.29480804E+03 0.37166624E+01
H2O2   O 2H 2      G      200      3500      1000      1
0.41650028E+01 0.49083168E-02-0.19013922E-05 0.37118600E-09-0.28790829E-13
-0.17861787E+05 0.29161565E+01 0.42761126E+01-0.54282241E-03 0.16733569E-04
-0.21577081E-07 0.86245438E-11-0.17702582E+05 0.34350507E+01

```

Gambar 4.3 Contoh format penulisan data termodinamika

Baris pertama terdiri dari nama spesi seperti N₂, AR, C, dan lain-lain. Simbol G menunjukkan bahwa spesi berada dalam fasa gas. Angka 300, 5000 dan 1000 menunjukkan rentang temperatur. Pada baris ke-2 sampai ke-4 merupakan data termodinamika yang terdiri dari bentuk polinomial untuk menghitung panas spesifik, entalpi standar dan entropi standar. Formatnya dapat menggunakan *Thermodynamic Database* pada *NASA Chemical Equilibrium Code* yang terdiri terdiri dari 14 koefisien, dimana 7 koefisien pertama untuk temperatur rendah dan 7 koefisien kedua untuk temperatur tinggi. Lima koefisien pertama dari masing-masing daerah temperatur, digunakan untuk menghitung kapasitas panas (C_p^0), dan dua koefisien berikutnya digunakan untuk menghitung harga entalpi standar (H^0) dan entropi standar (S^0). Persamaan yang digunakan untuk menghitung kapasitas panas (C_p^0), entalpi standar (H^0) dan entropi standar (S^0) adalah sebagai berikut [25]:

$$\frac{C_p^0}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (4.1)$$

$$\frac{H^0}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (4.2)$$

$$\frac{S^0}{R} = a_1 \ln T + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7 \quad (4.3)$$

Persamaan 4.2-4.3 digunakan untuk menghitung K_p [15],

$$K_p = \exp\left(\frac{\Delta S^0}{R} - \frac{\Delta H^0}{RT}\right) \quad (4.4)$$

ΔH^0 dan ΔS^0 dapat dicari dengan menggunakan persamaan [24]

$$\frac{\Delta H_i^0}{RT} = \sum_{k=1}^K v_{k_i} \frac{H_k^0}{RT} = \sum_{k=1}^K v_{k_i} \left(a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T} \right) \quad (4.5)$$

$$\frac{\Delta S_k^0}{R} = \sum_{k=1}^K v_{k_i} \frac{S_k^0}{R} = \sum_{k=1}^K v_{k_i} \left(a_1 \ln T + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7 \right) \quad (4.6)$$

dengan v_{ki} merupakan koefisien stoikiometri, k menunjukkan suatu spesi.

4.2.2 Mengembangkan Model Kinetika

Tahap pengembangan model kinetika dilakukan dengan menggunakan beberapa aplikasi yang tersedia di *software* Chemkin yaitu aplikasi SENKIN yang mewakili kondisi di *flow reactor* untuk mendapatkan profil konsentrasi spesi dan aplikasi AURORA untuk mendapatkan profil *ignition delay* dan profil konsentrasi di *jet stirred reactor* untuk sistem oksidasi toluena. Baik aplikasi SENKIN maupun AURORA membutuhkan beberapa masukan yang sama, yaitu mekanisme reaksi dan data termodinamika dengan format penulisan seperti yang telah dijelaskan pada bagian IV.2.1 diatas. Sedangkan masukan khusus untuk kondisi pada aplikasi SENKIN maupun AURORA berdasarkan pada kondisi penelitian. Secara garis besar masukan khusus ini berupa kondisi tekanan, temperatur, dan fraksi mol reaktan. Salah satu contoh penulisan masukan SENKIN dapat dilihat pada Gambar 4.4.



```
CONP
TEMP 1051.630
REAC C6H5CH3 0.00962
REAC O2 0.17316
REAC AR 0.8172
PRES 45.0
TIME 1.00E-1
DELT 1.E-4
DTSV 1.E-4
END
```

Gambar 4.4 Contoh format penulisan masukan aplikasi SENKIN

Istilah-istilah yang ada pada Gambar 4.4 dapat dijelaskan sebagai berikut.

CONP : sistem berada pada tekanan konstan

TEMP : temperatur gas masuk

PRES : tekanan masuk

REAC : fraksi mol reaktan

DELT : waktu untuk mencetak diagnosis file keluaran

END : kata kunci akhir untuk file masukan

Contoh masukan kondisi di aplikasi AURORA dapat dilihat pada Gambar 4.5.

```
TRAN
ENRG
QLOS 0.0
PRES 1.0
TEMP 1045
REAC c6h5ch3 0.0125
REAC o2 0.075
REAC ar 0.9125
TIME 3.0E-4
DELT 1.E-4
DTSV 1.E-6
TLIM 1440.
END
```

Gambar 4.5 Contoh format penulisan masukan aplikasi AURORA



Istilah-istilah yang ada pada Gambar 4.5 dapat dijelaskan sebagai berikut.

TRAN : kondisi proses adalah transient

ENRG : permintaan penyelesaian persamaan energi

QLOS : diasumsikan sama dengan 0 sehingga sistem adiabatik

PRES : tekanan mula-mula

TEMP : temperatur mula-mula

REAC : fraksi mol reaktan

TIME : waktu simulasi

TLIM : perkiraan temperatur tercapainya ignisi

DELT : waktu untuk mencetak diagnosis file keluaran

DTSV : waktu untuk menulis file solusi

END : kata kunci akhir untuk file masukan

4.2.3 Validasi Model

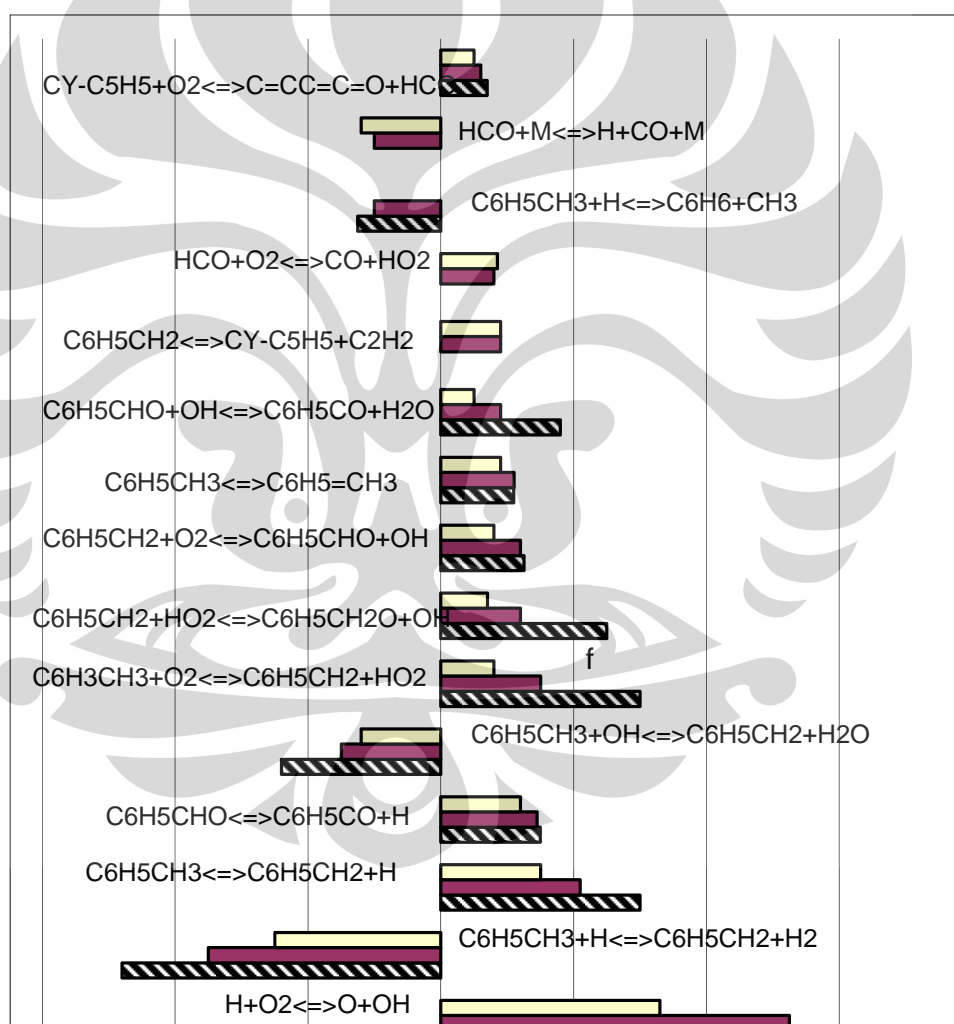
Tahap ini dilakukan dengan membandingkan hasil perhitungan dengan data penelitian. Data penelitian yang digunakan mengenai profil konsentrasi spesi dan profil *ignition delay* untuk sistem oksidasi dan pembakaran toluena. Profil *ignition delay* diperoleh dari penelitian yang telah dilakukan oleh D.F. Davidson , R.K. Hanson [5] serta Wing Tsang [6] dengan menggunakan alat berupa *shock tube*. Profil konsentrasi dari *flow reactor* diperoleh dari penelitian yang telah dilakukan oleh Emdee dan Brezinsky [2]. Validasi untuk profil konsentrasi dari *jet stirred reactor* tidak dilakukan dikarenakan belum tersedianya secara memadai data eksperimen dari para peneliti.

4.2.4 Analisis

IV.2.4.1 Analisis sensitivitas

Analisis ini digunakan untuk mengidentifikasi laju pembatas dari tahapan-tahapan reaksi. Analisis ini akan ditunjukkan secara detail pada tiap reaksi dalam mekanismenya [16]. Contoh Perhitungan numerik untuk analisis sensitivitas dapat dilakukan dengan mengubah koefisien laju reaksi khusus dan perhitungan konsentrasi OH. Perbedaan antara konsentrasi OH sebelum dan sesudah perubahan koefisien laju kemudian dihitung. Hasilnya lalu dibandingkan dengan

perbedaan terbesar yang dicapai oleh sistem. Hal ini disebut sebagai koefisien sensitivitas. Koefisien sensitivitas dapat bernilai negatif atau positif. Koefisien sensitivitas yang bernilai positif menunjukkan konsentrasi OH yang lebih tinggi dan meningkatkan laju reaksi keseluruhan sedangkan koefisien sensitivitas negative menunjukkan bahwa konsentrasi OH yang rendah dan menurunkan laju reaksi keseluruhan sistem. Koefisien sensitivitas dalam suatu sistem dapat digambarkan dalam diagram batang (Gambar 4.6). Hanya jalur oksidasi utama yang bertanggung jawab (penting) untuk oksidasi bahan bakar [14].



Gambar 4.6 Koefisien sensitivitas dengan variasi *equivalence ratio* (ϕ) dari campuran toluena/udara dalam *shock tube* 1.0 bar dan temperatur awal 1045 K .

4.2.4.2 Analisis Aliran Reaksi

Analisis aliran reaksi menghitung persentase kontribusi dari reaksi-reaksi yang berbeda ke pembentukan atau konsumsi spesi kimia yang terkait [17]. Seperti yang telah dijelaskan pada Tabel 2.1, metode analisis ini dilakukan dengan memperhatikan distribusi spesi. Spesi yang dihasilkan beberapa jalur reaksi dihitung persentasenya menggunakan program yang tersedia dalam *software* Chemkin 3.7.1.

4.2.5 Simulasi

Tahap ini dilakukan dengan mensimulasikan reaksi oksidasi toluena dengan memvariasikan kondisi operasi seperti tekanan, temperatur, rasio ekivalensi (ϕ), dan pengenceran dengan senyawa nitrogen (N_2) dan argon (Ar). Simulasi dilakukan dengan menggunakan program yang tersedia dalam *software* Chemkin 3.7.1.

4.2.6 Persamaan-persamaan Untuk Perhitungan Numeris (*Software*)

Pengukuran periode tunda ignisi disimulasikan dengan mengasumsikan adanya sejumlah tertentu konsentrasi awal untuk bahan bakar, oksidator dan inert. Sedangkan untuk konsentrasi spesies lainnya dihitung nol pada awalnya. Gas yang berada di dalam apparatus uji dianggap pada kondisi diam (tidak mengalir) terhadap acuan sistem koordinat laboratorium. Tabung kejut itu sendiri diasumsikan sebagai sistem volume konstan, adiabatik dalam batas-batas tertentu.

Dikarenakan apparatus uji merupakan sistem tertutup, maka massa total dalam campuran dianggap tetap:

$$m = \sum_{k=1}^K m_k = \text{konstan} \quad (4.7)$$

Disini m merupakan massa campuran total, sedangkan m_k adalah massa dari salah satu spesies uji. Laju produksi salah satu spesies secara reaksi kimia dipaparkan sebagai berikut :

$$\frac{dm_k}{dt} = V\dot{\omega}_k W_k \quad k = 1, \dots, K \quad (4.8)$$

Dimana V merupakan volume campuran, ω_k laju produksi molar dari salah satu spesies, W_k adalah massa molar dari salah satu spesies, dan K adalah jumlah total spesies.

Terkait dengan hukum kekekalan massa, maka persamaan (3.2) dapat dipecah menjadi beberapa bagian m , yang menyatakan *balance* dari spesies yang lebih mudah jika dirujuk menjadi fraksi-fraksi massa :

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{\omega_k W_k}{\rho} \quad k = 1, \dots, K \quad (4.9)$$

Dimana Y_k adalah fraksi massa dari salah satu spesies ke- k , sedangkan ρ merupakan berat jenis campuran. Laju produksi molar dari spesies ke- k dinyatakan sebagai berikut:

$$\omega_k = \sum_{l=1}^I (v_{k,l}'' - v_{k,l}') \left(k_{f,l} \prod_{i=1}^K [\chi_i]^{r_{li}} - k_{b,l} \prod_{i=1}^K [\chi_i]^{r_{li}} \right) \quad k = 1, \dots, K \quad (4.10)$$

dimana $[\chi_i]$ menandakan konsentrasi dari spesies χ_i , v'_{li} , dan v''_{li} merupakan koefisien stoikiometri dari reaktan dan produk untuk spesies ke- l dan reaksi elementer ke- i yang secara umum dapat dinyatakan dalam bentuk persamaan berikut :



dimana I merupakan jumlah total reaksi yang dimodelkan, sedangkan $k_{f,i}$ dan $k_{b,i}$ adalah koefisien-koefisien dari reaksi ke- i untuk reaksi maju dan reaksi balik. Untuk koefisien laju reaksi maju sering dinyatakan dalam bentuk persamaan Arrhenius yang dimodifikasi :

$$k_{f,i} = A_i T^{n_i} e^{-\frac{E_{a,i}}{RT}} \quad i = 1, \dots, I \quad (4.12)$$

dimana A_i adalah faktor pre-eksponensial, n_i merupakan eksponen temperatur, sedangkan $E_{a,i}$ merupakan energi aktivasinya. Untuk koefisien laju reaksi balik relatif terhadap reaksi maju dinyatakan dalam hubungannya dengan konstanta kesetimbangan $K_{C,i}$:



$$k_M = \frac{k_p}{K_{eq}} \quad (4.13)$$

Hukum pertama termodinamika menyatakan bahwa untuk suatu materi dalam sistem adiabatik dengan batas tertentu dinyatakan sebagai :

$$du = d(h - Pv) = 0 \quad (4.14)$$

dimana u adalah energi dalam spesifik, h merupakan entalpi spesifik, sedangkan P adalah tekanan total, v adalah volume spesifik ($v = 1/\rho$). Untuk kondisi reaksi pembakaran pada temperatur dan tekanan moderat, kondisi ini bisa dianggap gas ideal. Dalam hal ini entalpi spesifiknya dari campuran bisa dinyatakan sebagai berikut :

$$h = \sum_{k=1}^K h_k Y_k \quad (4.15)$$

dimana h_k adalah entalpi spesifik dari spesies ke- k . Untuk gas ideal, perubahan entalpi dalam hubungannya dengan kapasitas panas dinyatakan oleh persamaan berikut :

$$dh_k = c_{p,k} dT \quad (4.16)$$

dimana $c_{p,k}$ adalah kapasitas panas jenis untuk spesies ke- k , sedangkan T adalah temperatur campuran. Dengan mendifferensiasikan persamaan (3.9) terhadap waktu, dan mensubstitusikannya kedalam persamaan (3.10) untuk menentukan perubahan entalpi spesies dan kedalam persamaan (3.3) untuk menentukan perubahan fraksi massa, sehingga didapat persamaan *energy balance* sebagai berikut :

$$\sum_{k=1}^K Y_k c_{p,k} \frac{dT}{dt} + \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^K h_k \dot{\omega}_k W_k - \frac{1}{\rho} \frac{dP}{dt} = 0 \quad (4.17)$$

Dengan asumsi kondisi gas ideal diatas, tekanan dari campuran dinyatakan sebagai :

$$P = \frac{pRT}{\bar{W}} \quad (4.18)$$

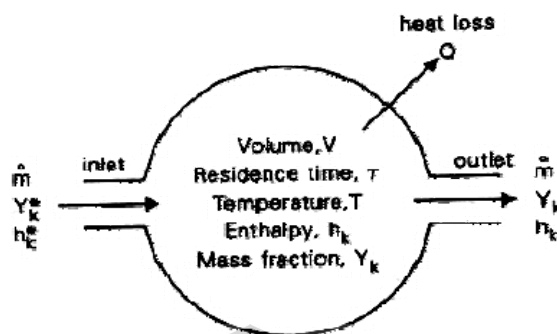
dimana R adalah konstanta gas universal, dan \bar{W} adalah massa molar rata-rata dari campuran.

4.2.6.1 Prosedur Perhitungan Numeris

Sistem untuk persamaan differensial biasa (3.3) dan (3.11) pada umumnya sulit untuk dicari penyelesaiannya. Prosedur pengintegrasian waktu dilakukan dengan menggunakan metode DASSL (*Differential Algebraic System Solver*-Petzold 1982) yang merupakan paket dari DASAC (*Differential Algebraic Sensitivity Analysis Code*).

4.2.6.1.1 Model Reaktor Teraduk Sempurna (*Perfectly Stirred Reactor, PSR*)

Pemodelan dengan aplikasi reaktor teraduk sempurna adalah pengkondisian yang diidealkan, teraduk secara simultan, reaktor aliran tanki, dengan kelengkapan saluran masuk dan keluar, dimana didalamnya campuran yang tidak bereaksi diluar system akan secara instant dicampurkan dengan fluida di dalam reaktor, dimana pada saat yang sama juga ada produk terbentuk yang dikeluarkan dari reaktor. Sistem reaktor ini dikarakteristikan dengan adanya volume reaktor, area permukaan, temperature dinding reaktor, temperature campuran, waktu tinggal atau laju alir, temperature campuran masuk berikut komposisinya termasuk juga dengan adanya transfer panas antara campuran yang bereaksi dan dinding reaktor.



Gambar 4.7 Skematik dari stirred reactor PSR

Pada kenyataannya, pencampuran yang terjadi di dalam reaktor tidak akan pernah memenuhi kondisi yang diidealkan, sehingga kekurang-homogenan dari campuran cenderung terjadi. Dan juga pada sisi lain, spesies radikal hilang dikarenakan bertumbukan dengan dinding reaktor dan kemungkinan juga adanya efek katalitik dari dinding reaktor, keadaannya belum bisa diketahui secara pasti. Namun pemodelan dengan reaktor ini masih merupakan teknik percobaan yang penting untuk analisa kinetika kimia.

- *Persamaan-persamaan untuk Perhitungan*

Neraca spesies dalam reaktor teraduk sempurna dinyatakan sebagai berikut :

$$\rho V \frac{dY_k}{dt} = -\dot{m}(Y_k - Y_k^*) + \phi W_k V, \quad k = 1, \dots, K \quad (4.19)$$

Tanda bintang pada persamaan diatas menyatakan kondisi masukan. Sedangkan untuk ruas kiri dari persamaan diatas menyatakan akumulasi netto dari spesies ke- k di dalam volume kendali dari sistem ini. Untuk suku pertama di ruas kanan persamaan adalah suku konvektif, sedangkan suku kedua merupakan suku sistem kimia.

Dengan mendefinisikan waku tinggal nominal sebagai :

$$\tau_R = \frac{\rho V}{\dot{m}} \quad (4.20)$$

sehingga neraca spesies pada persamaan (3.13) menjadi :

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{1}{\tau_R} (Y_k - Y_k^*) + \frac{\phi_k W_k}{\rho}, \quad k = 1, \dots, K \quad (4.21)$$

Dikaitkan dengan hukum termodinamika pertama untuk sistem terbuka, neraca energi untuk reaktor ini (pada tekanan konstan) dinyatakan :

$$\rho V \frac{dh}{dt} = -\dot{m} \sum_{k=1}^K (Y_k h_k - Y_k^* h_k^*) - \dot{Q} \quad (4.22)$$

dimana Q adalah laju panas hilang melalui dinding reaktor. Persamaan (3.16) dalam hubungannya dengan waktu tinggal dapat dinyatakan sebagai :

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{1}{\tau_R} \sum_{k=1}^K (Y_k h_k - Y_k^* h_k^*) - \frac{\dot{Q}}{\rho V} \quad (4.23)$$

Jika dikaitkan dengan persamaan (4.22) dan (4.23) akan didapatkan persamaan berikut :

$$\frac{dh}{dt} = c_p \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^K h_k \frac{dY_k}{dt} \quad (4.24)$$

Dengan menggunakan neraca spesies (3.15), neraca energinya menjadi :

$$c_p \frac{dT}{dt} = \frac{1}{\tau_R} \sum_{k=1}^K Y_k^* (h_k^* - h_k) - \sum_{k=1}^K \frac{h_k \phi_k W_k}{\rho} - \frac{\dot{Q}}{\rho V} \quad (4.25)$$

Untuk mendapatkan pengkondisian tunak (*steady state*), yang terkait dengan fungsi waktu, maka persamaan-persamaan diatas dihitung nol.

- *Pemecahan Secara Numeris*

Sistem persamaan-persamaan diatas dihitung secara numeris dengan algoritma Newton teredam (*damped Newton algorithm*) yang dipasangkan dengan integrasi waktu. Dalam tugas akhir ini, metode perhitungan numeris ini dilakukan dengan menggunakan *software* Chemkin 3.7 aplikasi Aurora transient dan senkin.



4.2.6.1.2 Reaktor Aliran Turbulen

Reaktor aliran turbulen (*turbulent flow reactor*) juga merupakan piranti penting untuk analisa kinetika kimia. Turbulensi memberikan dampak efektif dalam pencampuran sehingga meniadakan gradien konsentrasi dalam arah aliran. Dengan menggunakan campuran konsentrasi sangat kecil (*encer*) dalam pelarut gas inert untuk mengkondisikan keadaan isothermal, yang mana akan sangat menyederhanakan perhitungan persamaan dan menjadikan lebih fokus untuk analisa kinetika.

- *Persamaan-persamaan untuk Perhitungan*

Volume kendali untuk analisa ini adalah berkaitan dengan aliran yang sedang bereaksi. Dengan demikian volume kendali tidak saling bertukar massa dengan fluida luar. Konsentrasi spesies berubah dengan fungsi waktu, sebagai akibat dari laju produksi dan laju terkonsumsi oleh reaksi kimia sebagaimana dinyatakan dalam persamaan (2.2)–(2.4). Sistem aliran sering diasumsikan sebagai isothermal atau juga profil temperatur percobaan dapat digunakan untuk simulasi perhitungan ini. Pada kasus lain, persamaan energi tidak harus ditentukan / dipecahkan .

- *Pemecahan dengan Metode Numeris.*

Pada kasus ini persamaan-persamaan differensial akan dihitung dengan metode numeris melalui *software* Chemkin 3.7 aplikasi Plug.



BAB V

VALIDASI MEKANISME

Bab ini membahas validasi mekanisme model kinetika bahan bakar berkadar tertentu toluena dengan menggunakan data penelitian yang diperoleh dari percobaan tabung kejut (*shock tubes*) dan reactor alir (*plug/flow reactors*). Validasi model kinetika dilakukan dengan membandingkan data hasil penelitian yang diperoleh dari literature dengan data hasil perhitungan /simulasi yang tersedia di literatur. Model kinetika terdiri dari mekanisme reaksi toluena yang tersusun atas 107 spesies dan 671 reaksi elementer. Validasi model kinetika ini dilakukan dengan menggunakan *software* Chemkin 3.7.2.

5.1. SHOCK TUBE

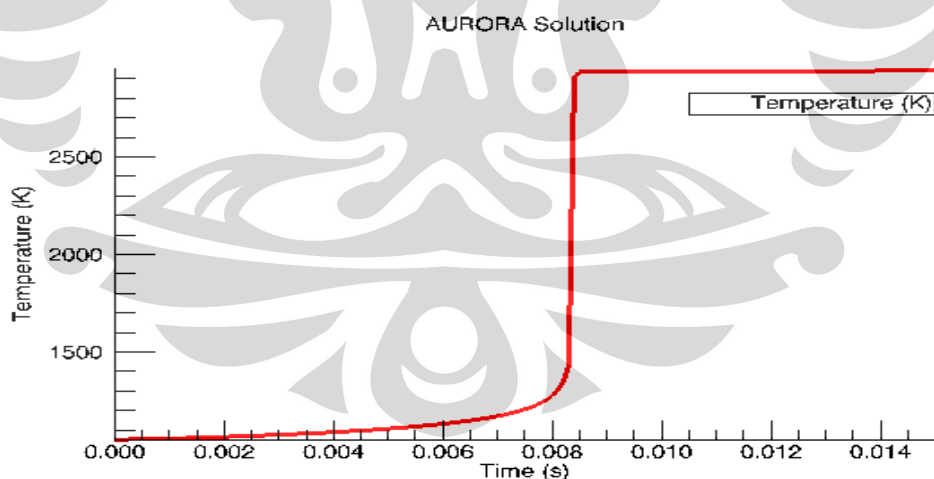
Ignisi campuran gas toluena, oksigen dan argon diteliti secara komprehensif pertama kali oleh Burcat [4]. Penelitian dilaksanakan pada mesin *shock tubes* dengan rentang temperatur dari 1226 hingga 1758 K, tekanan 236 kPa hingga 417 kPa, dan untuk rasio ekivalensi 0,25 dan 1,0. Kondisi percobaan lain dilakukan pada rentang temperature 1400 – 2000 K dan tekanan 1.5 – 5.0 atm dengan nisbah kesetaraan (*equivalence ratio*) 0.5 – 1.875 dan konsentrasi toluene 0.025-0.5 %. Waktu terbentuknya elemen radikal OH diukur dengan absorpsi sinar laser gelombang pendek (*narrow-linewidth ring dye laser absorption*) 306.7 nm. Data waktu ignisi diambil dari produk runutan (*traces*) radikal OH yang bersesuaian dengan data eksperimen pada kondisi percobaan. Waktu tunda ignisi didefinisikan sebagai waktu dimana konsentrasi OH telah mencapai 50 % dari kurva puncak. Pada penelitian ini, data yang digunakan untuk validasi adalah data hasil percobaan yang dilakukan oleh Davidson (paper#1) dengan konsentrasi bahan bakar toluena 0.00962 % dan *equivalence ratio* 0,5, 0,75 dan 1,0 dengan tekanan 25 bar dan 45 bar. Untuk mendapatkan kesesuaian yang lebih baik dari perbandingan yang dilakukan terhadap data *shock tube* eksperimental dan data simulasi ini beberapa modifikasi model kinetika dilakukan dengan merubah

konstanta Arrhenius dari beberapa reaksi yang sensitif. Modifikasi konstanta Arrhenius ini bisa dilihat pada Tabel 5.1.

Tabel 5.1. Modifikasi konstanta Arrhenius untuk validasi *shock tube*.

No. Reaksi	Reaksi Spesi	Konstanta Arrhenius Awal	Konstanta Arrhenius Modifikasi	%
1	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	8,30E+13	8,30E+11	99
503	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{O}_2 = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{HO}_2$	3,00E+14	5,00E+15	1567
504	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{OH} = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	1,26E+13	Sama	0
505	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{H} = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{H}_2$	1,20E+14	1,2E+13	900
506	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{H} = \text{C}_6\text{H}_6 + \text{CH}_3$	1,20E+13	1,2E+11	99
513	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{HO}_2 = \text{C}_6\text{H}_5\text{CHO} + \text{H} + \text{OH}$	5,00E+12	8,00E+15	1599

Simulasi numeris *ignition delay* pada *shock tubes* dilakukan dengan menggunakan AURORA Senkin *code* yang mengasumsikan sistem pada keadaan adiabatik dan volume tetap. Hasil simulasi untuk satu titik penentuan waktu tunda ignisi adalah dari *inflection temperature* yang dirujuk sebagai temperatur ignisi seperti yang terlihat pada Gambar 5.1. Perbandingan antara perhitungan dan hasil penelitian dapat dilihat pada Gambar 5.2 – Gambar 5.7.

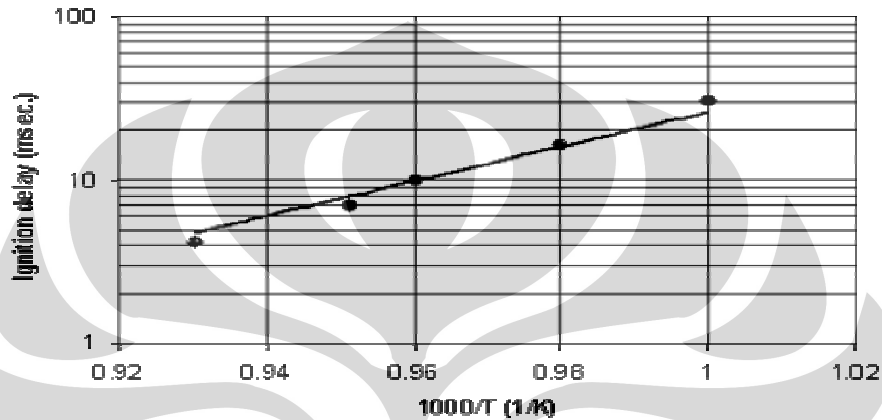


Gambar 5.1 Profil temperatur untuk *ignition delay time* di *shock tube* pada kondisi $P = 45$ bar $T = 1051$ K dan $\phi = 1.0$

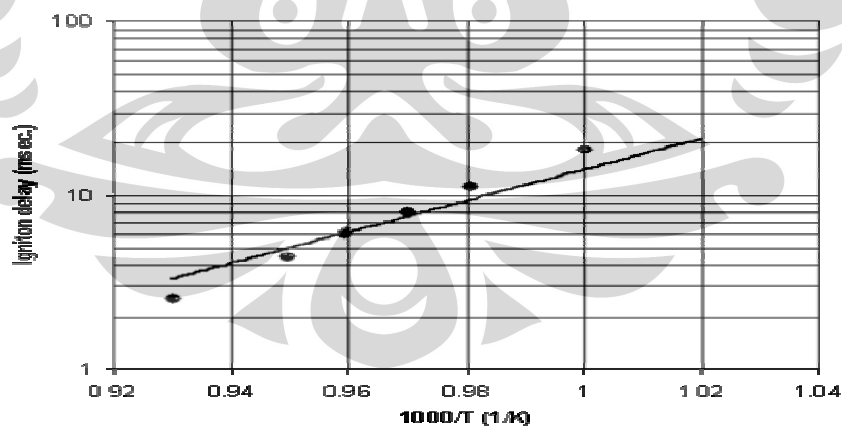
Gambar 5.1 menunjukkan perilaku temperatur di *shock tubes* dalam menentukan waktu tunda ignisi (*ignition delay times*). Gelombang bertekanan yang dihasilkan di dalam *shock tubes* akan meningkatkan temperatur dan tekanan sistem menjadi sangat tinggi. Peningkatan temperatur dan tekanan akan

meningkatkan reaktivitas sistem dan meningkatkan populasi kumpulan radikal. Kumpulan radikal yang cukup besar akan mengkonsumsi bahan bakar dan menyebabkan terjadinya ignisi.

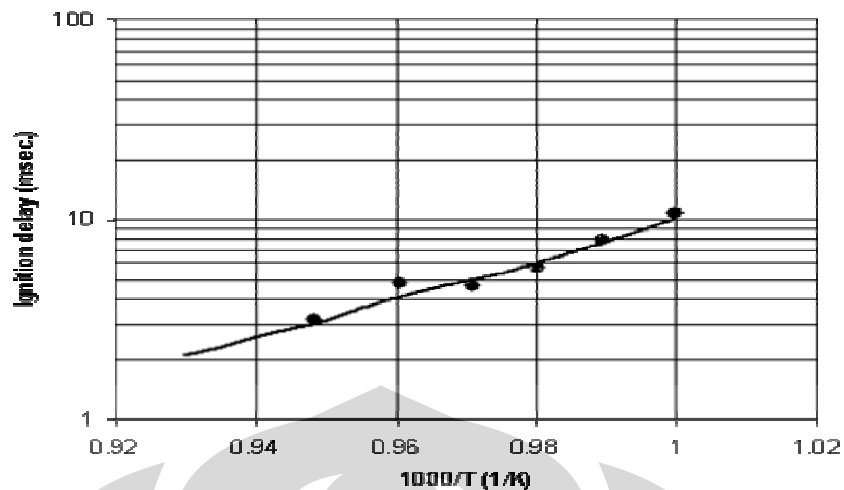
Perbandingan antara perhitungan dan hasil penelitian dapat dilihat pada Gambar 5.2 – Gambar 5.7.



Gambar 5.2. Perbandingan antara data penelitian *ignition delay* yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% $C_6H_5CH_3$, 8,65% O_2 , dan 90,38% Ar, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $P = 45$ bar.

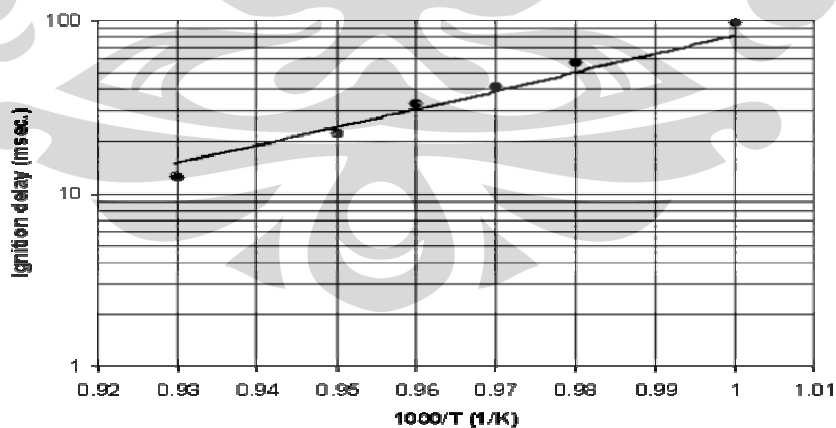


Gambar 5.3. Perbandingan antara data penelitian *ignition delay* yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% $C_6H_5CH_3$, 11,54% O_2 , dan 87,49% Ar, rasio ekivalensi (ϕ) = 0,75 dan $P = 45$ bar.

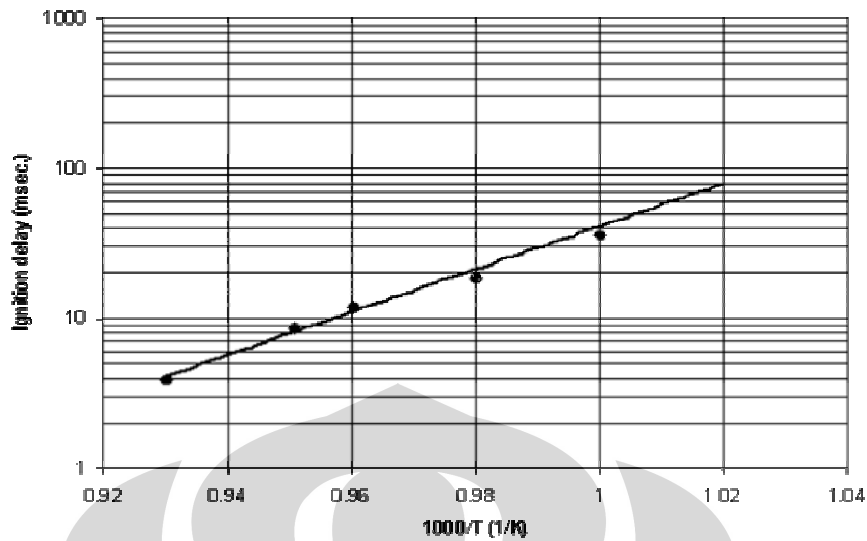


Gambar 5.4 Perbandingan antara data penelitian *ignition delay* yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% $C_6H_5CH_3$, 17,54% O_2 , dan 81,72% Ar, rasio ekivalensi (ϕ) = 0,5 dan $P = 45$ bar.

Dengan kondisi temperatur dan tekanan operasi yang sama, bisa dilihat bahwa dengan adanya perbedaan *equivalence ratio* dari Gambar 5.1 – Gambar 5.3 terlihat adanya perbedaan kenaikan waktu tunda ignisi sekitar 10 – 15 milidetik untuk setiap kenaikan 0,25 dari *equivalence ratio*. Tingkat kemiringan (*slope*) dari ketiga kurva yang beroperasi pada 45 bar tersebut bisa dikatakan ada kesamaan.



Gambar 5.5. Perbandingan antara data penelitian *ignition delay* yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% $C_6H_5CH_3$, 8,65% O_2 , dan 90,38% Ar, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $P = 25$ bar.



Gambar 5.6 Perbandingan antara data penelitian *ignition delay* yang diteliti oleh Davidson (simbol) dan perhitungan menggunakan model kinetika (garis). Kondisi operasi: 0,962% $C_6H_5CH_3$, 17,54% O_2 , dan 81,72% Ar, rasio ekivalensi (ϕ) = 0,5 dan P = 25 bar.

Untuk kondisi operasi 25 bar menunjukkan perbedaan yang lebih lebar untuk tiap kenaikan *equivalence ratio* yang sama. Dari Gambar 5.4 dan 5.4 ada kenaikan waktu tunda ignisi sekitar 11 sampai 78 milidetik untuk setiap kenaikan 0,5 *equivalence ratio*.

Secara keseluruhan dengan mengacu pada Gambar 5.1 sampai Gambar 5.5, *ignition delay times* ditunjukkan secara logaritmik terhadap kebalikan temperatur awal pada berbagai tekanan. Secara umum, perhitungan menunjukkan beberapa variasi kesesuaian terhadap data penelitian. Dari gambar yang ditunjukkan terlihat bahwa semakin tinggi temperatur yang digunakan, maka *ignition delay times* semakin kecil. Pada tekanan yang lebih tinggi dengan rasio ekivalen yang sama, *ignition delay times*nya pun semakin kecil. Hal ini menunjukkan bahwa pada temperatur yang semakin tinggi dan tekanan yang lebih tinggi, waktu tunda untuk mencapai ignisi semakin pendek sehingga ignisi semakin cepat tercapai. Sedangkan makin tinggi *equivalence ratio* pada temperatur dan tekanan yang sama menunjukkan tercapainya waktu tunda ignisi yang lebih lama.



5.2. PLUG FLOW REACTOR (PFR)

Data yang digunakan untuk validasi dari reaksi pembakaran toluena pada temperatur moderat diperoleh dari hasil penelitian Brezinsky dan Dryer [11]. Percobaannya dilakukan pada tekanan atmosfer pada jenis reaktor alir dengan menggunakan rasio ekivalensi (ϕ) 0,63 dan 1.4 dengan rentang waktu tinggal reaktor (*residence time*) pada 35 – 180 milidetik. Pengukuran konsentrasi spesies secara terperinci telah dilaporkan seperti halnya untuk toluena, benzena, bezaldehid, benzilalkohol, etilbenzena, metana, dan karbon monoksida.

Sedangkan untuk sub-mekanisme reaksi pembakaran toluena divalidasi baik itu untuk kondisi campuran sedikit kandungan bahan bakar (*lean fuel*) dengan rasio ekivalensi (ϕ) 0,63 maupun untuk kondisi campuran kaya bahan bakar (*rich fuel*) dengan rasio ekivalensi (ϕ) 1,4. Beberapa data hasil percobaan mengalami pergeseran sekitar 20-40 milidetik sebagaimana dianjurkan oleh Emdee.

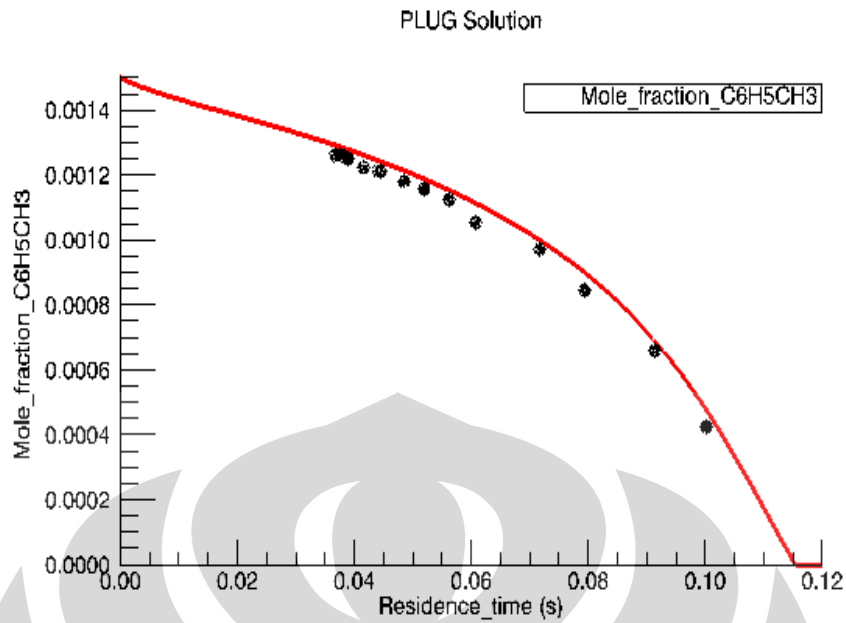
Konsentrasi untuk toluena, metana, karbon monoksida dan spesies lainnya sebagaimana terlihat pada Gambar 5.7 sampai 5.20 yang merupakan fungsi waktu tinggal dalam reaktor, baik itu campuran sedikit kandungan bahan bakar maupun kaya bahan bakar menunjukkan keakuratan yang cukup baik pada rentang kondisi percobaan. Untuk beberapa spesies yang menunjukkan penyimpangan keakuratan kemungkinan ada beberapa sub-mekanisme reaksi yang belum terdeteksi baik. Kemungkinan ini bisa berlaku baik itu pada rentang waktu tinggal reaktor tertentu maupun penyimpangan yang terjadi secara keseluruhan dari data perbandingan hasil percobaan dan data hasil simulasi.

Simulasi numeris pada *plug flow reactors* dilakukan dengan menggunakan PLUG code. Untuk mendapatkan kesesuaian yang lebih baik dari perbandingan yang dilakukan terhadap data *shock tube* eksperimental dan data simulasi ini beberapa modifikasi model kinetika dilakukan dengan merubah konstanta Arrhenius dari beberapa reaksi yang sensitif. Modifikasi konstanta Arrhenius ini bisa dilihat pada Tabel 5.2. Jumlah reaksi elementer hasil simulasi ini adalah sebanyak 617 reaksi dengan total spesi kimia 107 elemen. Keakuratan yang lebih baik bisa didapatkan dengan semakin banyaknya penyesuaian terhadap konstanta ini berdasarkan pada kondisi operasi yang diterapkan.

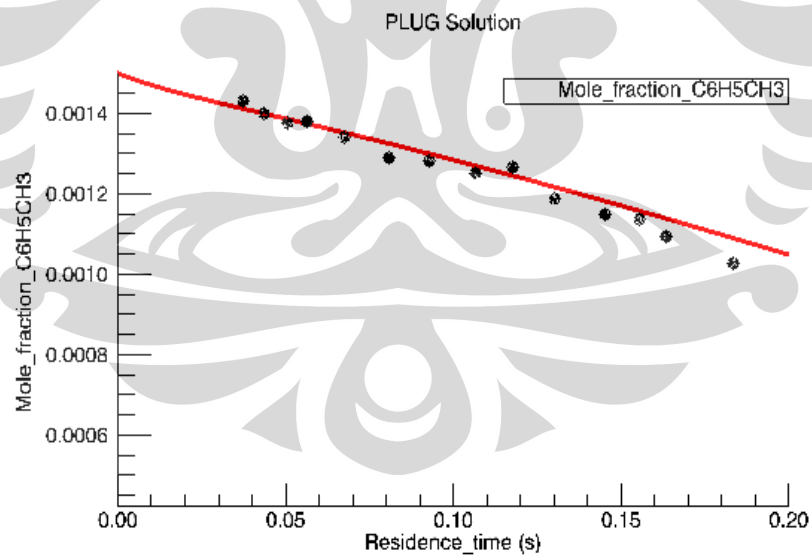
**Tabel 5.2.** Modifikasi konstanta Arrhenius untuk validasi *flow reactor*.

No. Reaksi	Reaksi Spesi	Konstanta Arrhenius Awal	Konstanta Arrhenius Modifikasi	%
1	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$	8,30E+13	8,30E+15	9900
503	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{O}_2 = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{HO}_2$	3,00E+14	5,00E+14	66,7
504	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{OH} = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	1,26E+13	1,26E+15	9900
505	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{H} = \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{H}_2$	1,20E+14	1,20E+13	90
506	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{H} = \text{C}_6\text{H}_6 + \text{CH}_3$	1,20E+13	3,20E+12	73,3
513	$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{HO}_2 = \text{C}_6\text{H}_5\text{CHO} + \text{H} + \text{OH}$	5,00E+12	8,00E+15	1599

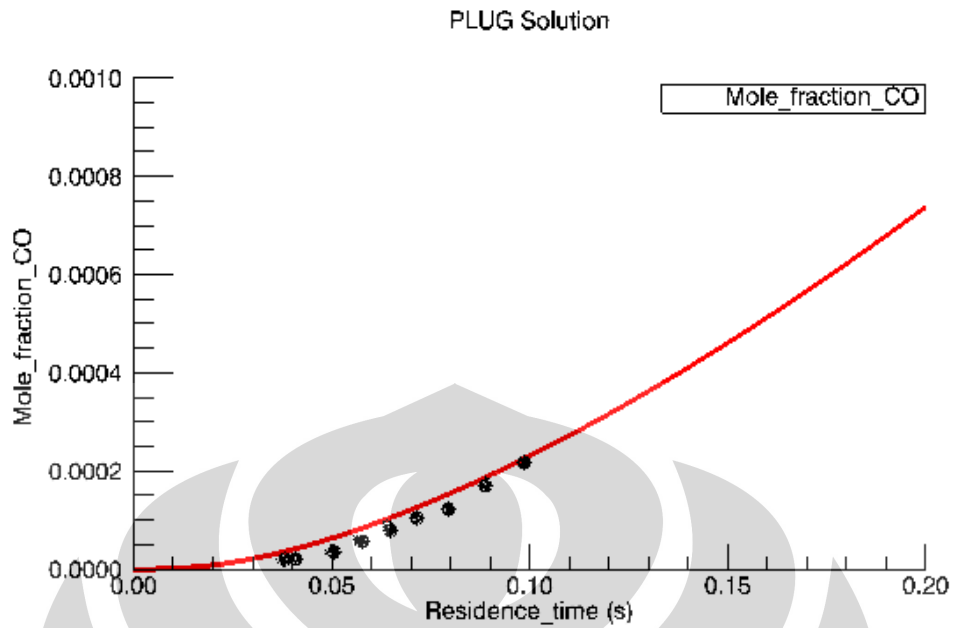
Konstanta Arrhenius awal adalah data yang diperoleh dari hasil percobaan Emdee dan sudah digunakan oleh Burcat untuk validasi mekanisme reaksi untuk sistem bahan bakar dengan toluena dan benzena, tekanan dan temperature yang bervariasi dengan keakuratan yang cukup baik. Sedangkan untuk validasi ini digunakan beberapa modifikasi konstanta Arrhenius, yang mana hal ini disebabkan oleh kondisi percobaan yang berberda dengan yang dilakukan oleh beberapa peneliti sebelumnya. Hasil validasi ini menunjukkan beberapa tingkat keakuratan yang berbeda-beda yang mana tergantung pada seberapa sensitif spesi yang ada dalam sistem reaksi pembakaran, termasuk didalamnya beberapa produk intermediat yang dihasilkan. Produk sistem reaksi ini terdiri dari 107 spesi kimia dan melibatkan 617 reaksi elementer. Dalam penelitian ini validasi hanya dilakukan untuk beberapa produk pembakaran yang umumnya banyak dibahas seperti CO dan beberapa spesi hidrokarbon. Produk hasil pembakaran ini dikategorikan sebagai emisi yang bisa diambil sebagai pembahasan mengenai seberapa jauh keefektifan sistem pembakaran dengan beberapa kondisi operasi yang diterapkan. Penerapan sistem reaksi *flow reactor* bisa dibandingkan dengan sistem reaktor lainnya yang dipakai pada simulasi ini.



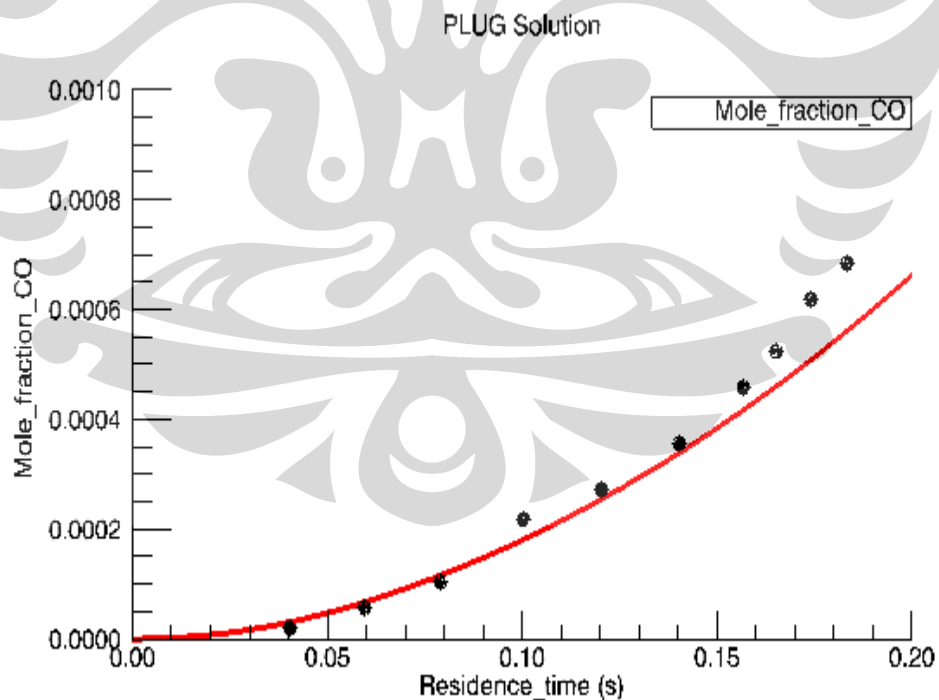
Gambar 5.7 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies $C_6H_5CH_3$ (garis). Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 2,14% O_2 dan 97,07% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.



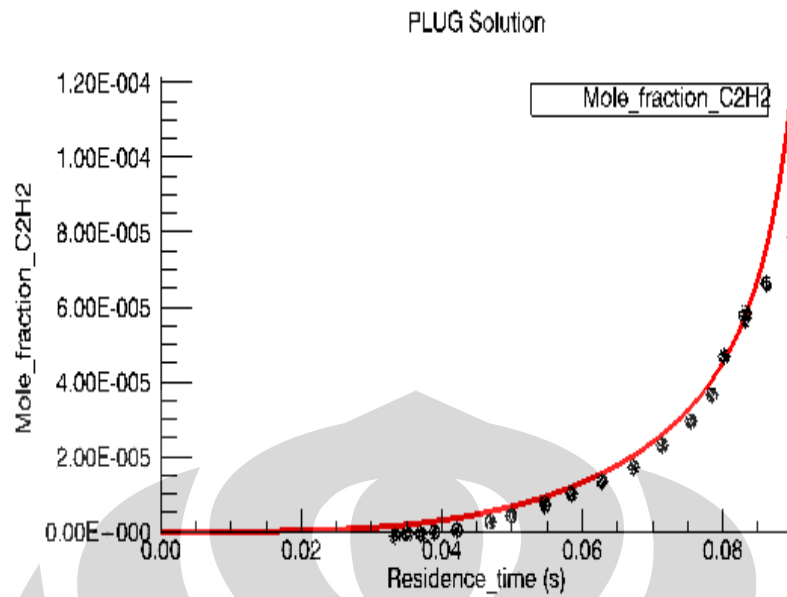
Gambar 5.8 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,4$ dengan hasil perhitungan untuk spesies $C_6H_5CH_3$ (garis). Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,886% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.



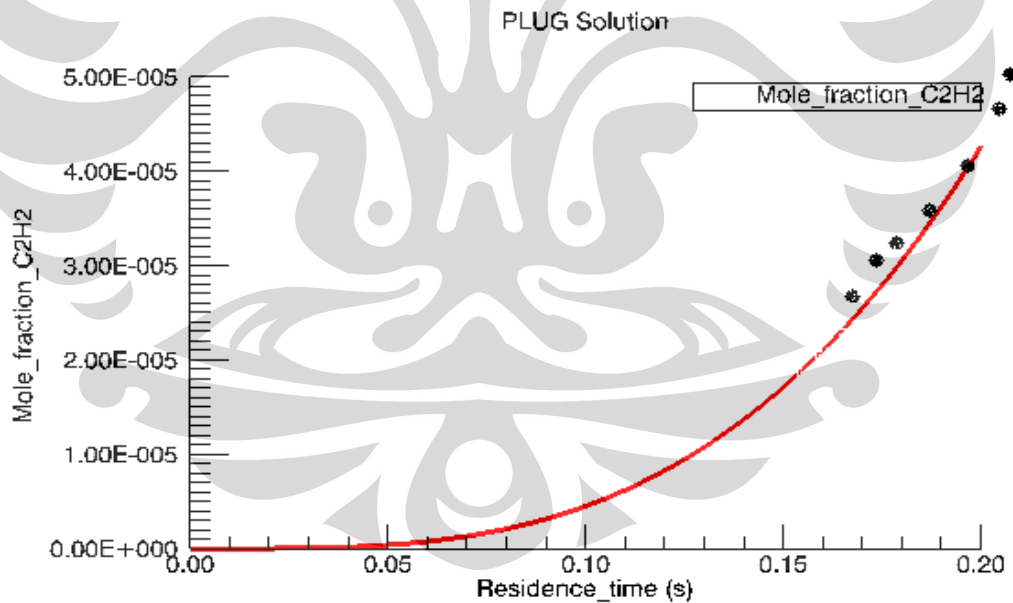
Gambar 5.9 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (garis) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies CO (garis). Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 2,14% O_2 dan 97,07% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1200$ K.



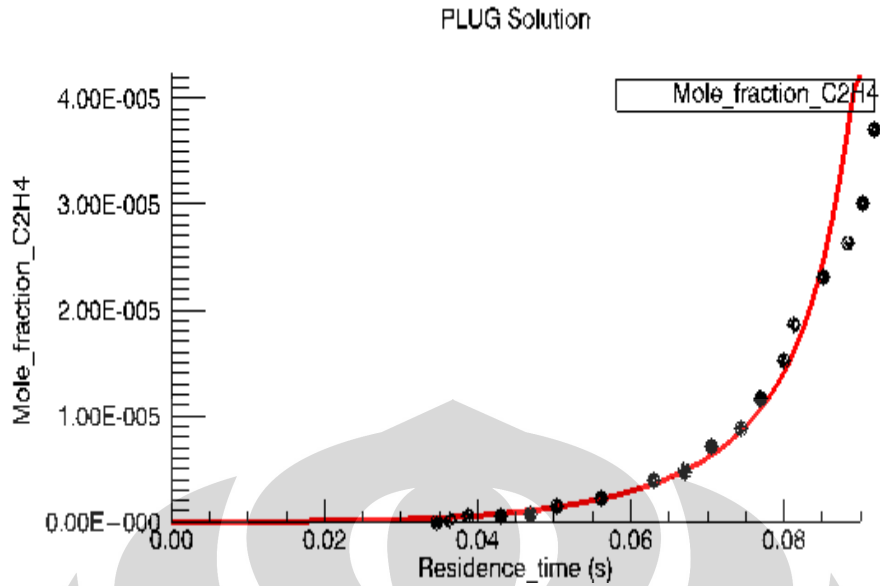
Gambar 5.10 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,40$ dengan hasil perhitungan untuk spesies CO (garis). Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,8867% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.



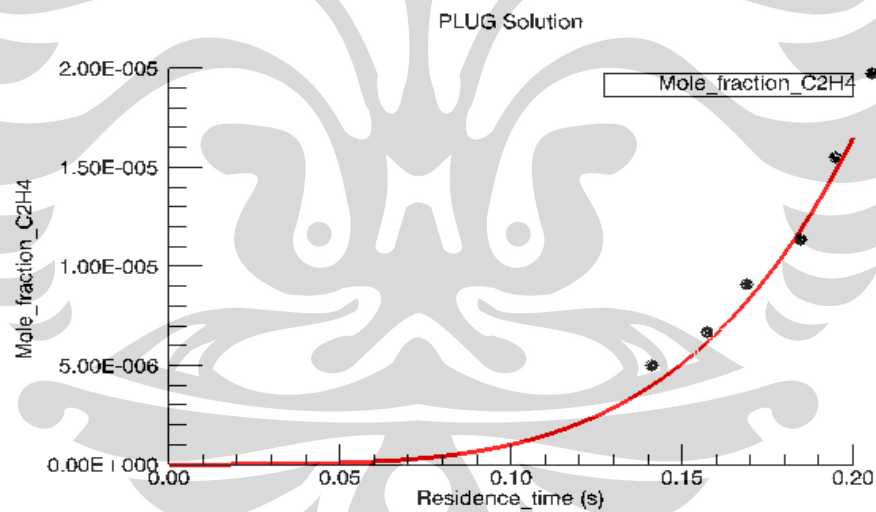
Gambar 5.11 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_2H_2 (garis). Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 2,14% O_2 dan 97,07% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.



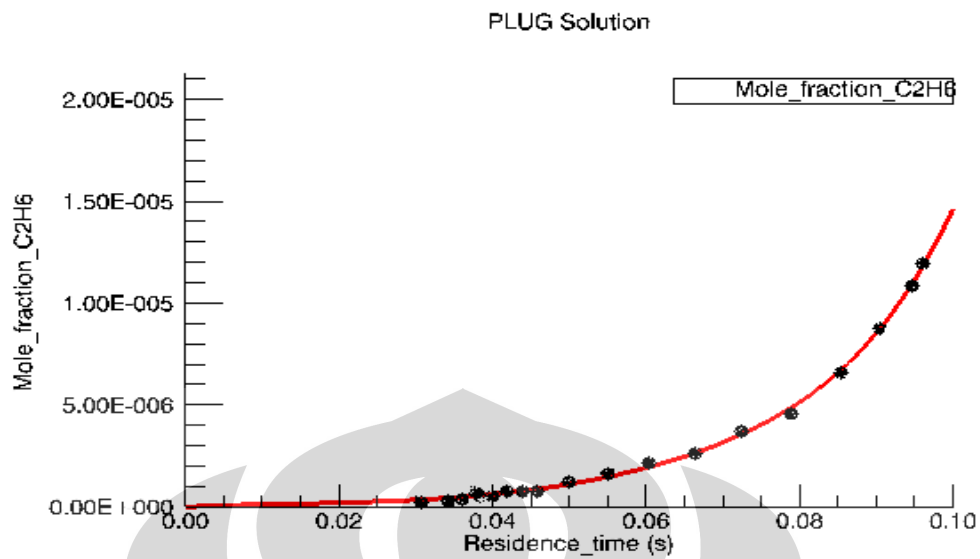
Gambar 5.12 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (garis) pada $\phi = 1,40$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_2H_2 (garis). Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,8867% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.



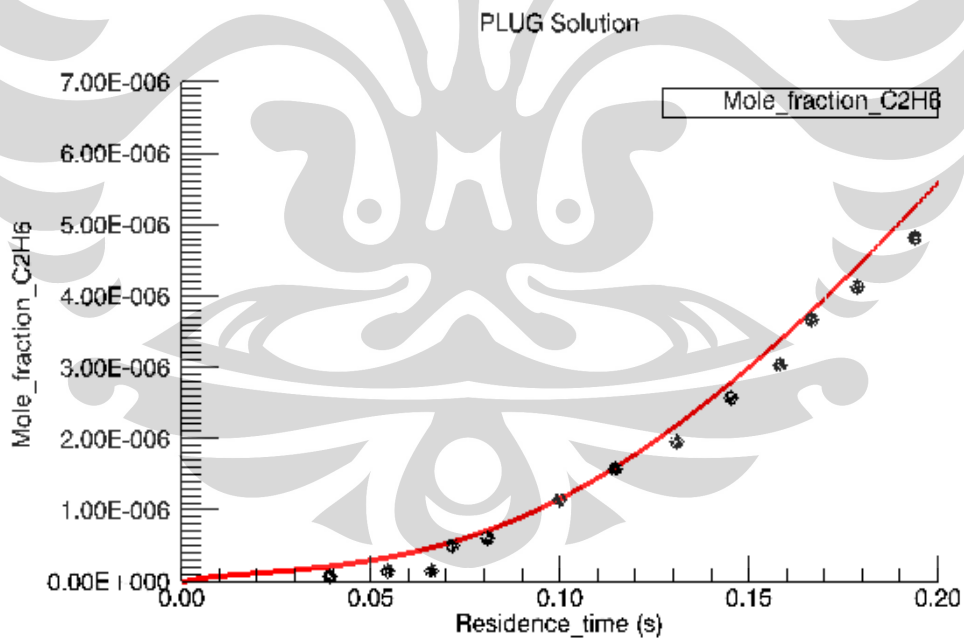
Gambar 5.13 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_2H_4 (garis). Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 2,14% O_2 dan 97,07% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.



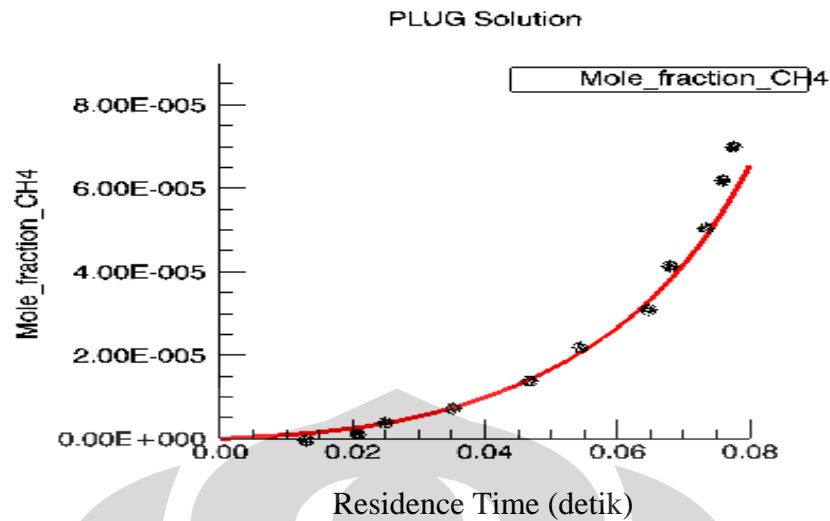
Gambar 5.14 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,40$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_2H_4 (garis). Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,8867% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.



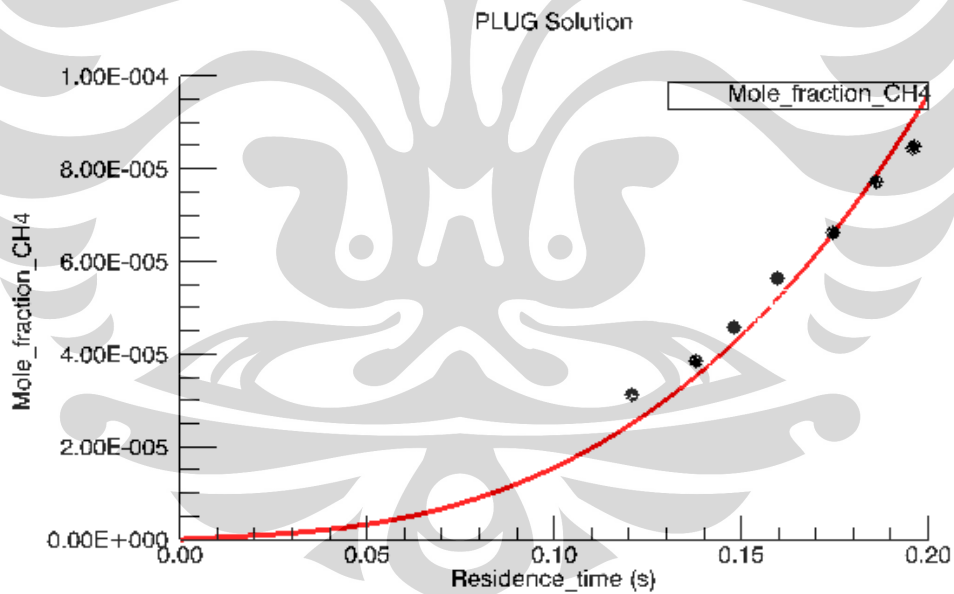
Gambar 5.15 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_2H_4 (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 2,14% O_2 dan 97,07% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1200$ K.



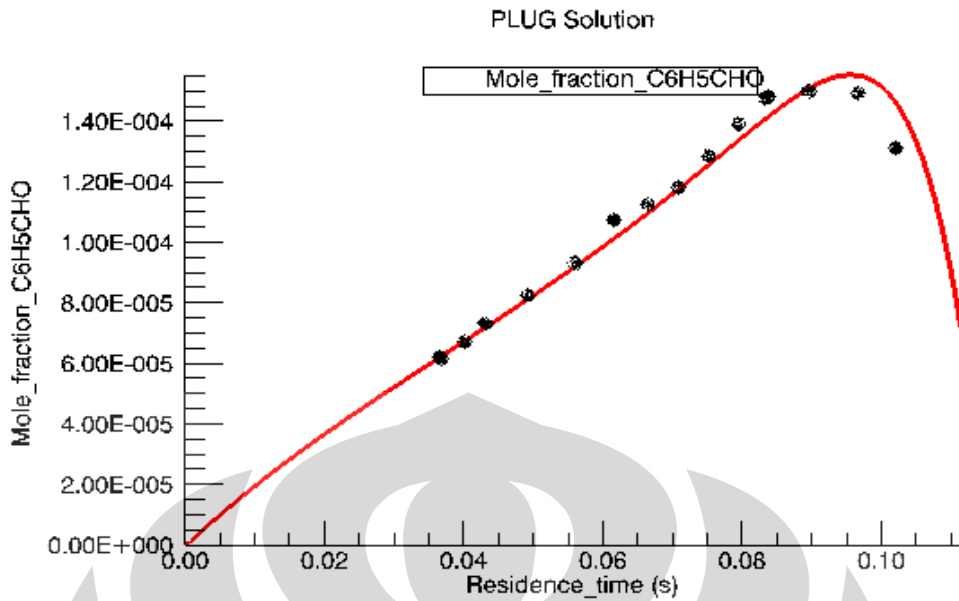
Gambar 5.16 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,4$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_2H_4 (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,886% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.



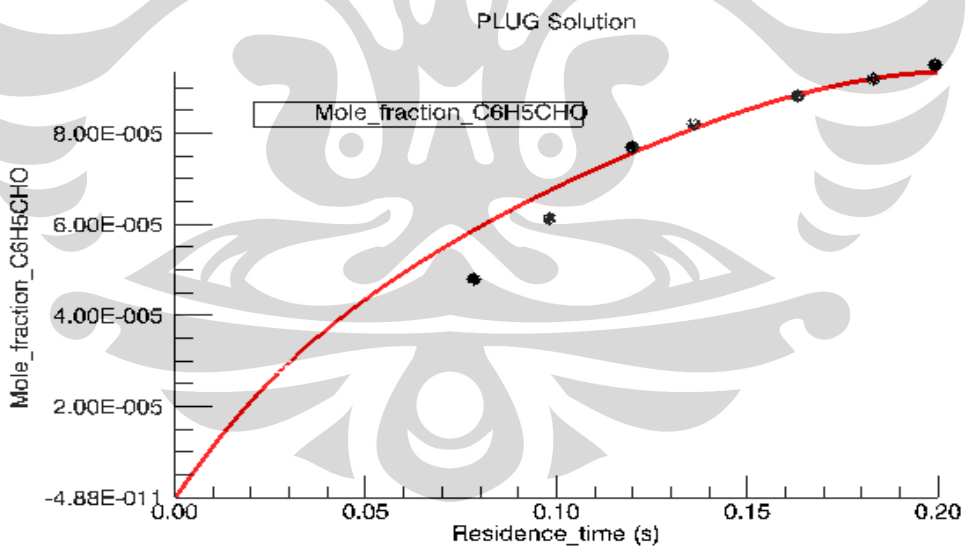
Gambar 5.17 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies CH_4 (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, 2,14% O_2 dan 97,07% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{\text{in}} = 1190$ K.



Gambar 5.18 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,4$ dengan hasil perhitungan untuk spesies CH_4 (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, 0,964% O_2 dan 98,886% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{\text{in}} = 1190$ K.



Gambar 5.19 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 0,63$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_6H_5CHO (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 2,14% O_2 dan 97,77% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1200$ K.



Gambar 5.20 Perbandingan antara data penelitian yang diteliti oleh Brezinsky dan Dryer^[2] (titik) pada $\phi = 1,4$ dengan hasil perhitungan untuk spesies C_6H_5CHO (garis). Hasil perhitungan mengalami pergeseran waktu sebesar 20 ms. Kondisi penelitian : 0,15% $C_6H_5CH_3$, 0,964% O_2 dan 98,886% Ar, $P = 1$ atm dan $T_{in} = 1190$ K.

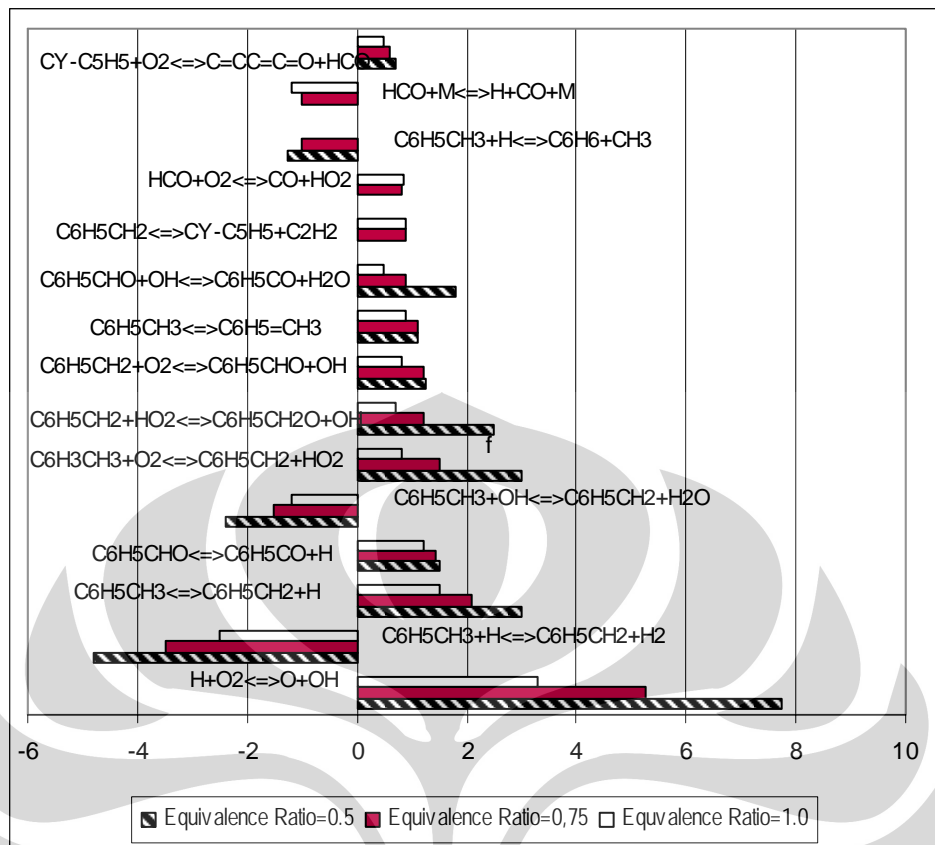


BAB VI

ANALISIS MEKANISME

6.1 ANALISIS SENSITIFITAS

Untuk mengidentifikasi tahap-tahap reaksi pembatas laju (*rate-limiting reaction*), metode analisis sensitivitas dilakukan dengan menggunakan data-data hasil simulasi perhitungan. Metode perhitungan numeris untuk analisis sensitivitas dilakukan dengan cara mengubah koefisien laju dari reaksi-reaksi tertentu dan menghitung konsentrasi gugus radikal hidroksil OH. Perbedaan konsentrasi OH sebelum dan sesudah perubahan koefisien laju kemudian dihitung. Hasil ini kemudian dibandingkan dengan perbedaan terbesar yang diperoleh pada sistem. Harga/nilai yang diperoleh dari hasil perhitungan diatas dirujuk sebagai koefisien sensitivitas. Koefisien sensitivitas dapat bernilai positif atau negatif. Koefisien sensitivitas yang bernilai positif menandakan konsentrasi radikal OH yang lebih tinggi, dan peningkatan keseluruhan laju reaksi. Sedangkan koefisien sensitivitas yang bernilai negatif menandakan konsentrasi radikal OH yang lebih rendah, dan penurunan keseluruhan laju reaksi dari sistem. Koefisien sensitivitas pada suatu sistem digambarkan dalam bentuk diagram batang. Gambar 6.1 dan Gambar 6.2 menunjukkan koefisien sensitivitas dari campuran toluena/oksigen/nitrogen pada percobaan reaktor alir dengan kondisi rasio ekuivalensi dan pada *residence time* tertentu. Dalam hal analisa sensitifitas dengan metode reaktor *plug flow reactor*, laju reaksi utama alur terkonsumsinya toluena adalah melalui reaksi abstraksi rantai bagian alkil. Terkonsumsinya toluena terlihat lebih menunjukkan sensitifitas yang lebih kuat untuk meningkatkan koefisien kecepatan reaksi addisi oksigen. Sensitifitas dari terkonsumsinya toluena yang disebabkan oleh dekomposisi termal dengan putusya ikatan C-C menunjukkan penurunan dengan semakin lamanya waktu tinggal dalam reaktor (*residence time*). Pada akhirnya, dekomposisi termal toluena yang melalui terputusnya ikatan C-H memperlihatkan efek terminasi rantai yang mana menunjukkan peningkatan dengan semakin lamanya waktu tinggal dalam reaktor.

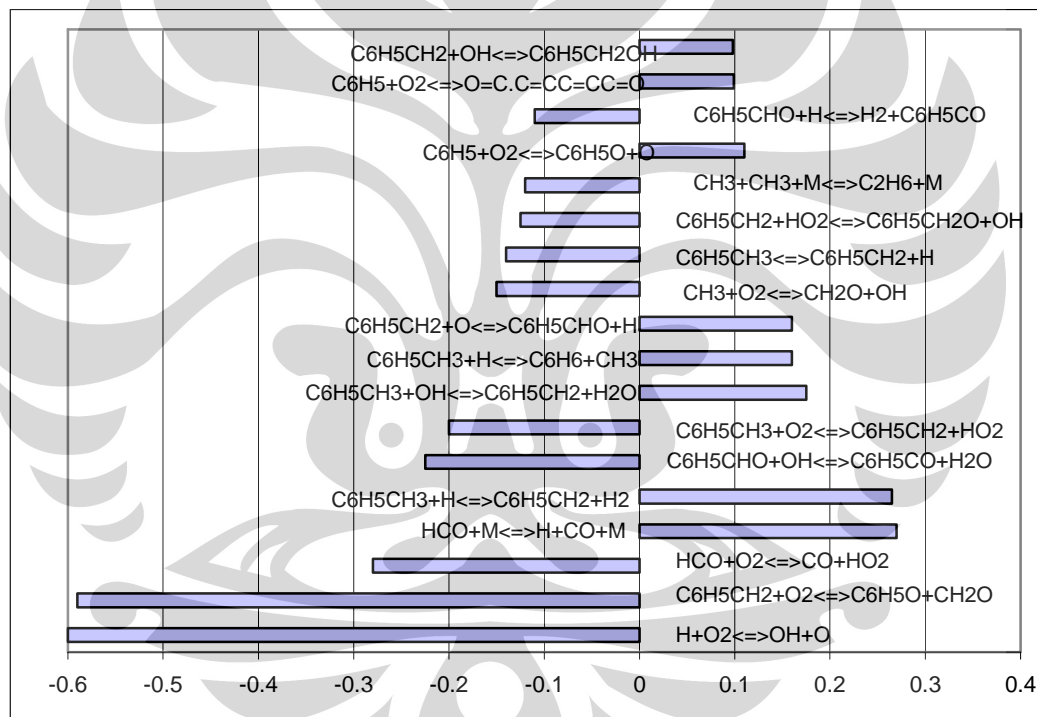


Gambar 6.1. Analisis sensitivitas OH dari beberapa reaksi penting untuk *ignition delay* pada campuran *lean* dan *rich fuel*, berdasarkan kondisi penelitian Brezinsky dan Dryer [2] pada *shock tube*. $P = 1 \text{ bar}$, $T = 1090$, $\phi = 0,5, 1,0 \text{ dan } 1,5$ (0,1557% $C_6H_5CH_3$, 1,844% O_2 dan 98,0% N_2).

Dari analisa sensitivitas sebagaimana terlihat pada Gambar 6.1, yang dihasilkan melalui percobaan *shock tube* untuk menentukan koefisien laju reaksi yang mengendalikan reaksi oksidasi toluena pada kondisi percobaan. Dari kode Senkin menunjukkan adanya perubahan konsentrasi dari spesies sebagai akibat dari dinaikkannya koefisien laju reaksi. Konsentrasi radikal OH dipilih sebagai suatu indikator dari reaktivitas keseluruhan dari system. Alternatif lain bisa juga ditentukan melalui analisa dari konsentrasi toluene yang dihasilkan. Sensitivitas dari konsentrasi OH sebagai terhadap adanya perubahan pada koefisien laju reaksi juga ditunjukkan dari Gambar 6.1 diatas. Reaksi yang menunjukkan sensitivitas paling tinggi adalah reaksi percabangan rantai $H+O_2$. Sensitivitas dari pengendali reaksi yang lainnya adalah juga dikarenakan dipicu oleh reaksi tersebut. Sedangkan reaksi abstraksi $C_6H_5CH_3+H \rightleftharpoons C_6H_5CH_2+H$, dimana terlepasnya atom H akan mengarah pada reaksi percabangan melalui reaksi $H+O_2$



yang menunjukkan angka sensitifitas negatif yang tinggi yang akan menghambat ignisi. Dalam hal reaksi dekomposisi toluena $C_6H_5CH_3 \rightleftharpoons C_6H_5CH_2 + H$, dimana radikal H yang dihasilkan ini juga mengarah pada reaksi percagangan tetapi menunjukkan angka sensitifitas positif yang tinggi sehingga mempercepat ignisi. Reaksi lain seperti reaksi dekomposisi benzaldehid $C_6H_5CHO \rightleftharpoons C_6H_5CO + H$, juga menunjukkan sensitifitas positif yang tinggi. Dengan disertakannya reaksi ini akan secara signifikan meningkatkan prediksi dari percobaan *shock tube* pada kondisi temperatur tinggi. Reaksi toluena dengan OH menunjukkan sensitifitas negatif yang tinggi dan dengan demikian akan menghambat ignisi. Pada kondisi percobaan dengan kandungan rendah bahan bakar (*lean fuel*), seperti reaksi $C_6H_5CH_3 + O_2 \rightleftharpoons C_6H_5CH_2 + HO_2$ menunjukkan sensitifitas positif yang tinggi.



Gambar 6.2. Analisis sensitifitas OH dari beberapa reaksi penting untuk reactor alir pada campuran *lean* dan *rich fuel*, berdasarkan kondisi penelitian Brezinsky dan Dryer [2] pada *shock tube*. $P = 1$ bar, $T = 11730$, $\phi = 0,76$ (0,1557% $C_6H_5CH_3$, 1,844% O_2 dan 98,0% N_2) dan *residence time* 135 milidetik.

Analisa sensitifitas untuk percobaan reaktor alir pada kondisi tekanan atmosfer sebagaimana diajikan pada Gambar 6.2 adalah hasil simulasi dengan menggunakan Senkin dan mekanisme kinetika detil. Komponen reaksinya adalah toluene dan oksigen yang dilarutkan dalam N_2 yang menjdikannya berkonsentrasi 98% (volume). Analisa sensitifitas dengan Senkin ini juga untuk menentukan



koeffisien laju reaksi yang mengendalikan reaksi oksidasi toluene pada kondisi operasi dari percobaan. Konsentrasi toluene dipilih sebagai indikator reaktifitas keseluruhan dari system. Sensitifitas dari konsentrasi toluene pada kondisi waktu tinggal reactor 135 milidetik terhadap perubahan koeffisien laju reaksi. Pada kondisi waktu tinggal ini, jumlah toluena yang terkonsumsi reaksi berkisar 48%. Sensitifitas negative menunjukkan bahwa reaksi ini bersifat mempercepat reaksi keseluruhan sedangkan untuk sensitifitas positif menunjukkan efek sebaliknya. Reaksi yang menunjukkan sensitifitas yang paling tinggi adalah reaksi percabangan $H+O_2$. Untuk reaksi lain yang juga menunjukkan hal yang sama adalah reaksi $C_6H_5CH_2+O_2 \rightleftharpoons C_6H_5O+CH_2O$. Sedangkan reaksi $HCO+O_2 \rightleftharpoons CO+HO_2$ yang berkontribusi mendukung reaksi oksidasi bahan bakar dengan dihasilkannya radikal HO_2 yang akan bereaksi dengan radikal benzyl, $C_6H_5CH_2+HO_2 \rightleftharpoons C_6H_5CH_2O+OH$ dimana merupakan reaksi dengan sensitifitas negatif yang juga mendukung berlangsungnya reaksi oksidasi bahan bakar. Sedangkan reaksi toluene dengan H menunjukkan sensitifitas negative, sehingga akan menghambat jalannya reaksi oksidasi.

6.2 ANALISIS ALIRAN REAKSI

Analisis aliran reaksi menghitung persentase kontribusi reaksi pada pembentukan atau konsumsi spesi kimia. Sub bab ini membahas analisis aliran reaksi campuran toluena/oksigen/argon di *perfectly stirred reactor* pada tekanan 45 atm, rasio ekivalensi 0,5, 0,75 dan 1,0 dan temperatur 1045 K. Analisis ini untuk mengetahui sejauh mana pengaruh perubahan kondisi operasi terhadap konversi suatu spesies kimia terhadap produk tertentu. Kondisi operasi yang divariasikan dalam simulasi analisis aliran reaksi ini adalah perbedaan tekanan yang cukup besar yang diterapkan pada rekasinya, yaitu sebesar 25 atm.

6.2.1 Kontribusi Reaksi terhadap Konsumsi Toluena dan Pembentukan Intermediet

6.2.1.1 *Perfectly Stirred Reactor*

Konsumsi toluena di *perfectly stirred reactor* pada tekanan 45 atm, rasio ekivalensi 1,0 dan temperatur 1045 K sebanyak 66,2% diperoleh melalui abstraksi atom H oleh radikal OH. Beberapa reaksi yang terlibat pada reaksi pembakaran



toluena dan besaran kontribusinya dalam % mol untuk produksi maupun konsumsinya yang dihasilkan oleh simulasi Chemkin *code* SENKIN dalam beberapa tahap reaksi sebagai berikut:

- Kontribusi toluena ($C_6H_5CH_3$)

$C_6H_5CH_3+OH\rightleftharpoons C_6H_5CH_2+H_2O$	48,9%
$C_6H_5CH_3+H\rightleftharpoons C_6H_5CH_2+H_2$	2,18%
$C_6H_5CH_3+H\rightleftharpoons C_6H_6+CH_3$	3,01%
$C_6H_5CH_3+H\rightleftharpoons C_6H_5CH_2+H_2$	1,03%
$C_6H_5CH_2+C_6H_5OH\rightleftharpoons C_6H_5CH_3+C_6H_5O$	19,22%
$C_6H_5CH_2+HOC_6H_4CH_3\rightleftharpoons C_6H_5CH_3+OC_6H_4CH_3$	25,66%

- Kontribusi karbonmonoksida (CO)

$HCO+M\rightleftharpoons CO+H+M$	4,11%
$HCO+O_2\rightleftharpoons CO+HO_2$	16,24%
$HMLO+O_2\rightleftharpoons OH+_2CO$	28,07%
$CH_2CO+H\rightleftharpoons CH_3+CO$	3,02%
$C_6H_5CO\rightleftharpoons C_6H_5+CO$	17,54%
$C_6H_4O_2+H\rightleftharpoons CO+C_5H_5O-1,3$	3,94%
$C_6H_4O_2+O\rightleftharpoons 2CO+C_2H_2+CH_2CO$	1,54%
$C_6H_5O\rightleftharpoons CO+C_5H_5$	11,71%
$C_5H_4O+H\rightleftharpoons CO+c-C_4H_5$	5,34%
$C_5H_4O+O\rightleftharpoons CO+HCO+C_3H_3$	8,50%
$CO+O+M\rightleftharpoons CO_2+M$	-1,10%
$CO+OH\rightleftharpoons CO_2+H$	-42,81%
$CO+HO_2\rightleftharpoons CO_2+OH$	-56,08%

Hasil reaksi netto dari laju konsumsi dan produksi CO dari reaksi-reaksi diatas sebesar $2,93 \text{ E-}05 \text{ mol/ml.detik}$ CO yang dikategorikan sebagai buangan (emisi). Beberapa hidrokarbon ringan yang dalam hal ini sebagai produk intermediat dari reaksi pembakaran toluena seperti CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 dan C_2H_6 . Tahapan reaksi produksi (+) dan konsumsi (-) dan besaran kontribusi diuraikan sebagai berikut:



- Kontribusi metana (CH₄)

CH ₃ +HO ₂ \rightleftharpoons CH ₄ +O ₂	14.35%
CH ₃ +CH ₂ O \rightleftharpoons CH ₄ +HCO	8.96%
CH ₄ +H \rightleftharpoons CH ₃ +H ₂	10.02%
pC ₃ H ₄ +CH ₃ \rightleftharpoons C ₃ H ₃ +CH ₄	1,39%
C ₆ H ₅ CH ₃ +CH ₃ \rightleftharpoons C ₆ H ₅ CH ₂ +CH ₄	18,92%
C ₆ H ₅ CHO+CH ₃ \rightleftharpoons C ₆ H ₅ CO+CH ₄	46,36%
CH ₃ +H ₂ O ₂ \rightleftharpoons CH ₄ +HO ₂	-1,67%
CH ₄ +O \rightleftharpoons CH ₃ +OH	-5,59%
CH ₄ +OH \rightleftharpoons CH ₃ +H ₂ O	-92.73%

Netto dari reaksi yang melibatkan CH₄ sebesar 1,247E-07 mol/ml.detik adalah sebagai emisi.

- Kontribusi Asetilen (C₂H₂)

C ₆ H ₄ O ₂ +O \rightleftharpoons 2CO+C ₂ H ₂ +CH ₂ CO	71,5%
c-C ₄ H ₅ +H \rightleftharpoons C ₂ H ₄ +C ₂ H ₂	2,2%
c-C ₄ H ₅ +O \rightleftharpoons CH ₂ CHO+C ₂ H ₂	25,1%
C ₂ H ₂ (+M) \rightleftharpoons H ₂ ML(+M)	-5,8%
C ₂ H ₃ (+M) \rightleftharpoons C ₂ H ₂ +H(+M)	-18,1%
C ₂ H ₂ +O \rightleftharpoons HMLO+H	-51,1%
C ₂ H ₂ +OH \rightleftharpoons CH ₂ CO+H	-1,10%
C ₂ H ₂ +OH \rightleftharpoons C ₂ H+H ₂ O	-3,36%
C ₂ H ₂ +CH ₃ \rightleftharpoons pC ₃ H ₄ +H	-2,2%
C ₂ H ₃ +O ₂ \rightleftharpoons C ₂ H ₂ +HO ₂	-2,2%

Netto produk asetilen (C₂H₂) sebesar 1,765E-07 mol/ml.detik adalah sebagai emisi.

- Kontribusi Etilena (C₂H₄)

CH ₃ +HMLO \rightleftharpoons C ₂ H ₄ +CO	1,9%
C ₂ H ₄ +H(+M) \rightleftharpoons C ₂ H ₅ (+M)	12,1%
C ₂ H ₅ +O ₂ \rightleftharpoons C ₂ H ₄ +HO ₂	46,9%
aC ₃ H ₄ +O \rightleftharpoons C ₂ H ₄ +CO	2,1%



$p\text{C}_3\text{H}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CO}$	9,7%
$c\text{-C}_4\text{H}_5 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_2$	26,5%
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{C}_2\text{H}_3$	-3,6%
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HCO}$	-13,9%
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	-33%
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{CHO} + \text{OH}$	-10,1%
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_3 \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5\text{O} + \text{C}_2\text{H}_4$	-37,9%

Netto produksi dari reaksi ini sebesar $5,81\text{E}-09$ mol/ml.detik adalah sebagai emisi.

- Kontribusi Etana (C_2H_6)

$2\text{CH}_3(+\text{M}) \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_6(+\text{M})$	100%
$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	-2,1%
$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{O} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{OH}$	-5,2%
$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	-91,4%

Netto produksi dari reaksi ini sebesar 0 mol/ml.detik adalah sebagai emisi.

Beberapa hidrokarbon siklis sederhana seperti benzena (C_6H_6) dan benzaldehida ($\text{C}_6\text{H}_5\text{CHO}$) tahapan reaksi dan kontribusi dijabarkan sebagai berikut:

- Kontribusi Benzena (C_6H_6)

$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_6 + \text{CH}_3$	31,9%
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3 + \text{C}_6\text{H}_5 \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2 + \text{C}_6\text{H}_6$	3,6%
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CHO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_6 + \text{HCO}$	4,8%
$\text{OC}_6\text{H}_4\text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_6 + \text{H} + \text{CO}$	57,7%
$\text{C}_6\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{H}$	1,0%
$\text{C}_6\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$	-75,8%
$\text{C}_6\text{H}_6 + \text{O} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5\text{O} + \text{H}$	-5,5%
$\text{C}_6\text{H}_6 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{H}$	-5,5%
$\text{C}_6\text{H}_5\text{OH} + \text{C}_6\text{H}_5 \rightleftharpoons \text{C}_6\text{H}_5\text{O} + \text{C}_6\text{H}_6$	-7,2%

Netto produksi dari reaksi ini sebesar $1,7\text{E}+07$ mol/ml.detik adalah sebagai emisi.



- Kontribusi Benzaldehida (C_6H_5CHO)

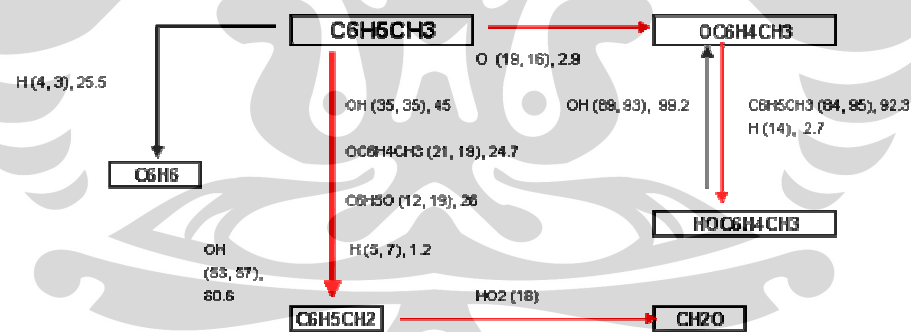
$C_6H_5CH_2+O \rightleftharpoons C_6H_5CHO+H$	4,6%
$C_6H_5CHO+OH \rightleftharpoons C_6H_5CO+H_2O$	33,6%
$C_6H_5CHO+H \rightleftharpoons C_6H_5CO+H_2$	1,6%
$C_6H_5CHO+C_6H_5CH_2 \rightleftharpoons C_6H_5CO+C_6H_5CH_3$	61,3%
$C_6H_5CHO+CH_3 \rightleftharpoons C_6H_5CO+CH_4$	1,6%
$C_6H_5CO \rightleftharpoons C_6H_5+CO$	-100%

Netto produksi dari reaksi ini sebesar 0 mol/ml.detik adalah sebagai emisi.

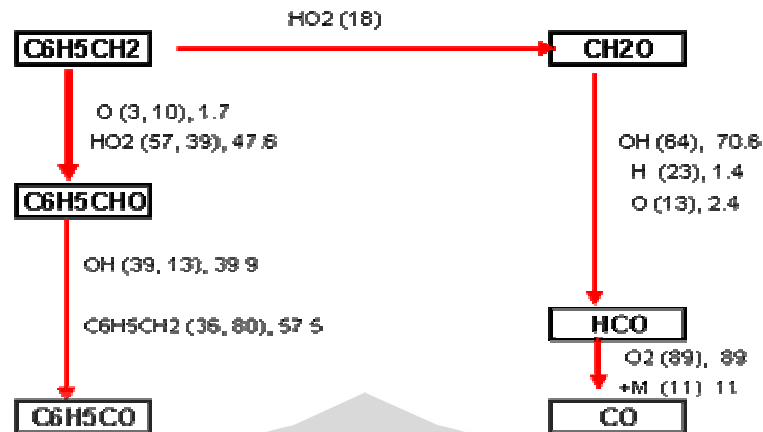
6.2.2 Kontribusi reaksi pembakaran toluena terhadap beberapa produk reaksi.

6.2.2.1 Perfectly Stirred Reactor

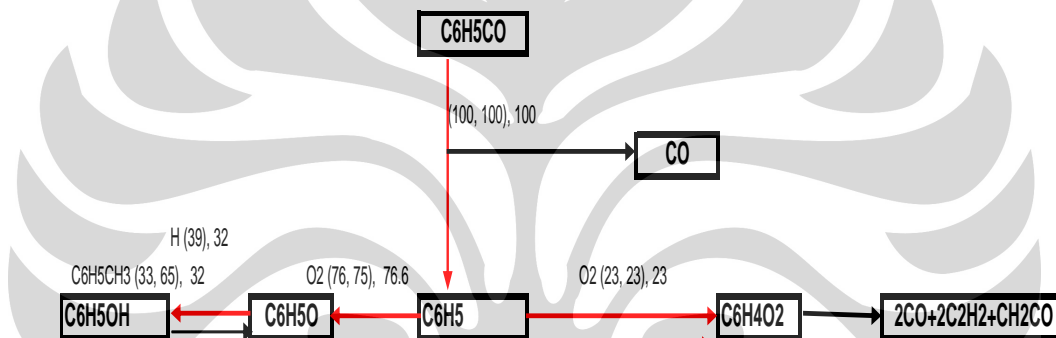
Pada kondisi tekanan 45 atm dan 25 atm, rasio ekivalensi 1,0 dan temperatur 1045 K, tahapan produksi beberapa spesies dapat dilihat pada Gambar 6.4. Dua angka pertama adalah hasil percobaan Davidson dan Djurisic [5], sedangkan angka ketiga adalah hasil simulasi Senkin.



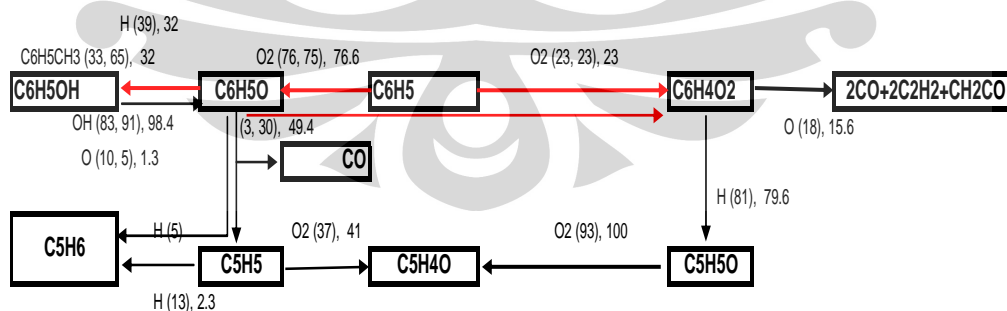
Gambar 6.3 Tahapan pembentukan spesi-spesi C_6H_6 , $OC_6H_4CH_3$, $C_6H_5CH_2$, $HOC_6H_4CH_3$ dan CH_2O pada *perfectly stirred reactor*, pada $P = 45$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.



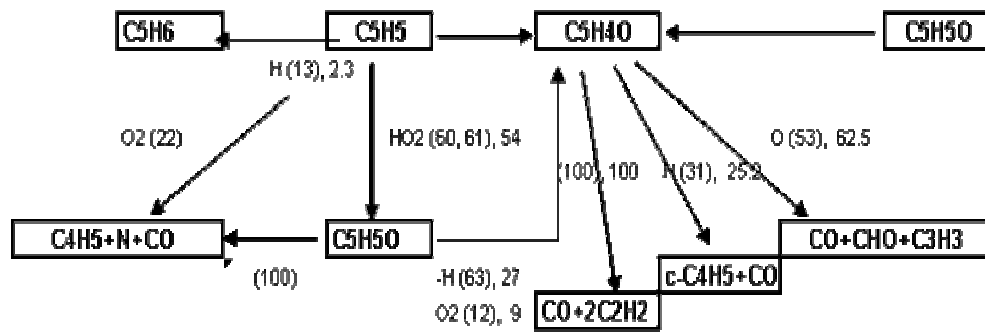
Gambar 6.4 Tahapan pembentukan spesi-spesi C_6H_5CO dan CO pada *perfectly stirred reactor*, pada $P = 45$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.



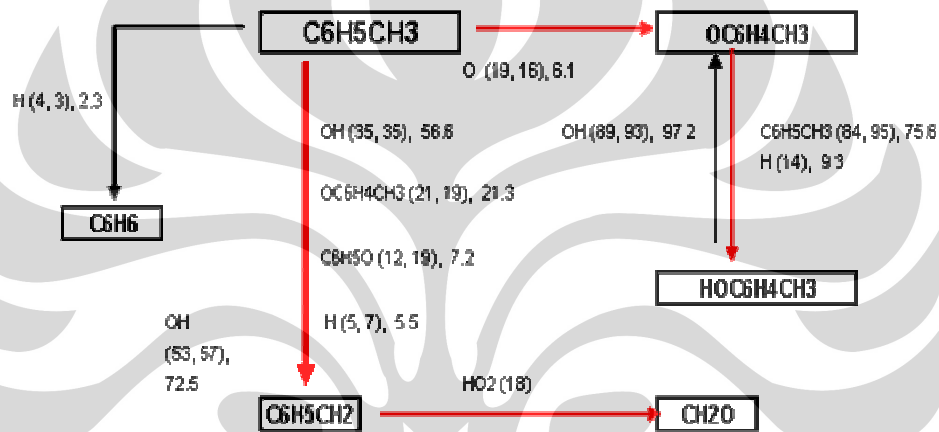
Gambar 6.5 Tahapan pembentukan spesi-spesi C_6H_5OH , CO , C_2H_2 dan CH_2CO pada *perfectly stirred reactor*, pada $P = 45$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.



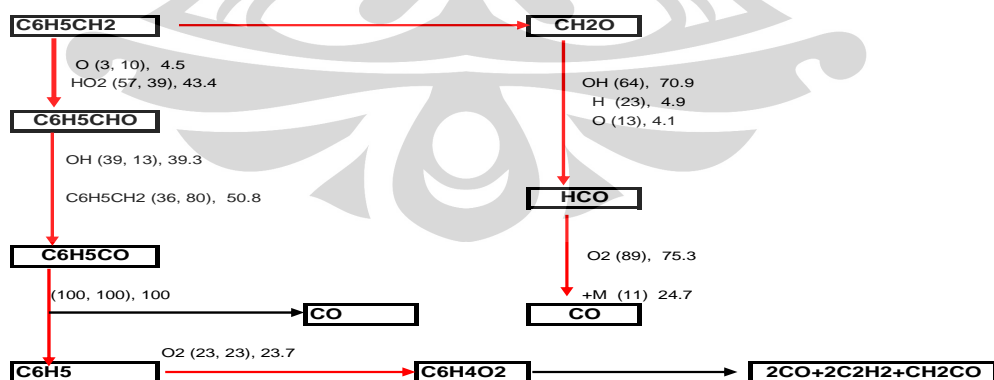
Gambar 6.6 Tahapan pembentukan spesi-spesi C_5H_6 dan C_5H_4O pada *perfectly stirred reactor*, pada $P = 45$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.



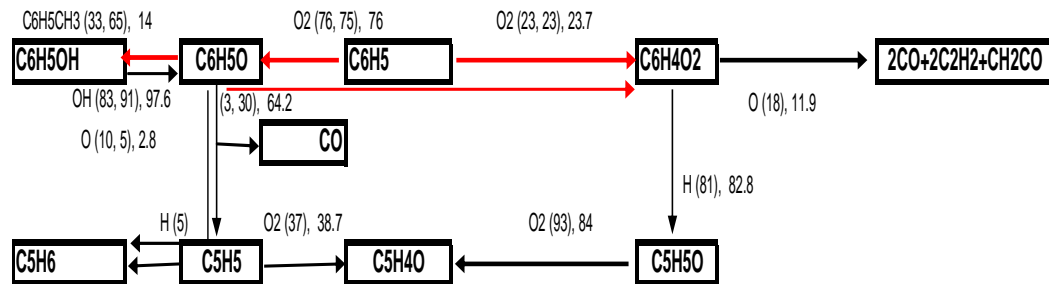
Gambar 6.7 Tahapan pembentukan spesi-spesi CO dan CHO pada *perfectly stirred reactor*, pada $P = 45$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.



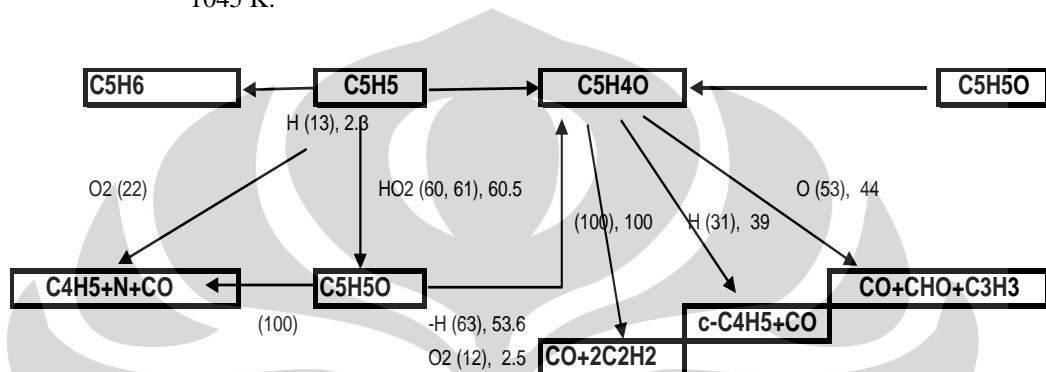
Gambar 6.8 Tahapan pembentukan spesi-spesi C_6H_6 , $OC_6H_4CH_3$, $C_6H_5CH_2$, $HOC_6H_4CH_3$ dan CH_2O *perfectly stirred reactor*, pada $P = 25$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.



Gambar 6.9 Tahapan pembentukan spesi-spesi C_6H_5CO dan CO pada *perfectly stirred reactor*, pada $P = 25$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.



Gambar 6.10 Tahapan pembentukan spesi-spesi C_6H_5OH , CO , C_2H_2 dan CH_2CO pada *perfectly stirred reactor*, pada $P = 25$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.



Gambar 6.11 Tahapan pembentukan spesi-spesi CO dan CHO *perfectly stirred reactor*, pada $P = 25$ atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 dan $T = 1045$ K.

Dari analisa aliran reaksi sebagaimana terlihat pada Gambar 6.3-6.11, pengaruh tekanan pada 25 atm dan 45 atm terhadap perubahan dan atau pembentukan spesi kimia didapatkan beberapa perbedaan dalam hal tingkat konversi untuk pembentukan produk-produk reaksi. Namun tiap-tap spesi kimia tidak menunjukkan kecenderungan yang seragam terhadap perbedaan tekanan ini. Hal ini disebabkan sensitifitas spesi-spesi terhadap tekanan adalah tidak sama. Secara kinetika dan termodinamika pun pengaruh tekanan terhadap reaksi akan beragam, yang mana tergantung pada jenis reaksi apakah eksotermis atau endotermis, jumlah mol yang terlibat pada reaktan maupun produk. Namun dalam hal konversi ke arah spesi CO , pengaruh tekanan tidak mempengaruhi konversi reaktannya yang tetap terkonversi 100 %.



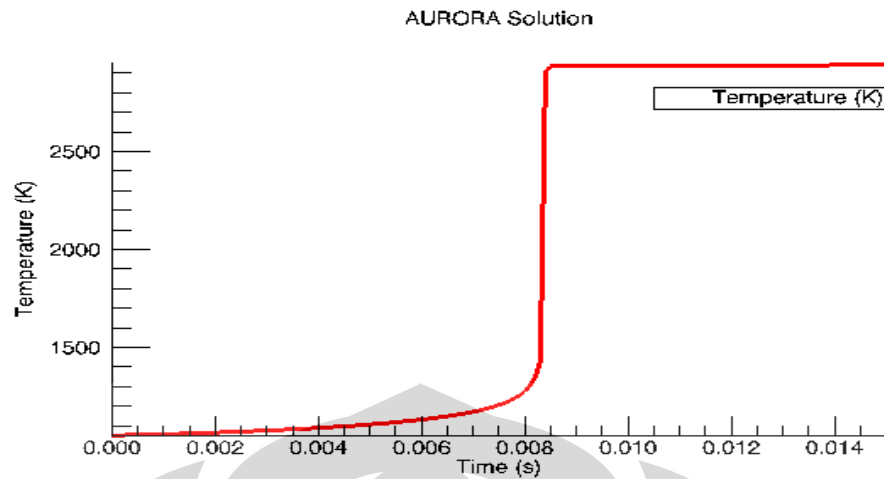
BAB VII

SIMULASI

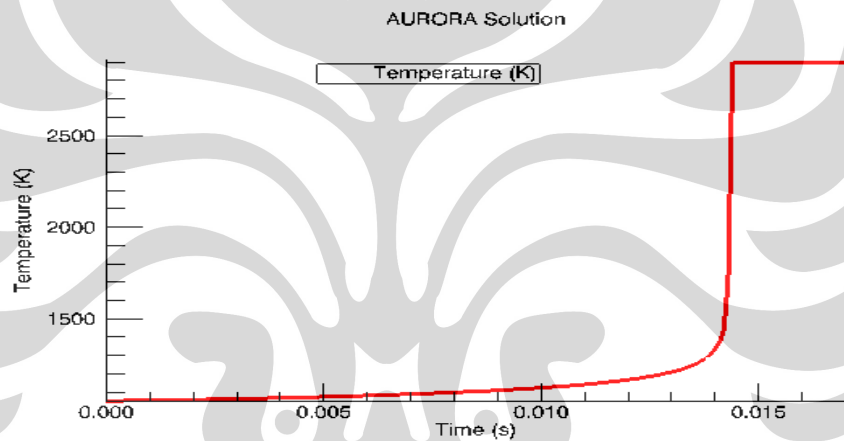
Simulasi oksidasi toluena dilakukan untuk *jet stirred reactor* dengan kondisi tekanan 45 atm, temperatur 1092 K, dan rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,65% O₂ dan 90,38% Ar). Pada *flow reactor* simulasi dilakukan untuk kondisi tekanan 1 atm, temperatur 1200 K, dan rasio ekivalensi (ϕ) = 0,63 (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,65% O₂ dan 90,38% Ar) dibandingkan dengan kondisi tekanan 2 atm dengan lainnya sama dan juga pada kondisi temperatur 1190 K dengan rasio ekivalensi 1,4 (0,962% C₆H₅OCH₃, 6,184% O₂ dan 92,85% Ar) pada tekanan 1 atm. Sementara untuk simulasi *shock tube* dilakukan untuk kondisi tekanan 45 bar dan 25 bar. Pada semua simulasi ini akan divariasikan temperatur, tekanan dan rasio ekivalensi.

7.1 SHOCK TUBE

Pada simulasi *ignition delay time* (waktu tunda ignisi) digunakan hasil validasi yang menunjukkan kesesuaian yang bagus terhadap data percobaan dari Brezinsky dan Dryer [2]. Hasil validasi ini kemudian disimulasikan kembali dengan menggunakan *software* Chemkin 3.7 untuk mendapatkan gambaran unjuk kerja reaksi pembakaran pada rentang kondisi operasi yang diinginkan. mengalami perubahan kondisi percobaan pada tekanan dan rasio ekivalensi (ϕ) sesuai dengan data yang dituliskan pada Lampiran-1. Pada Gambar 7.1 dan Gambar 7.2 hasil simulasi *shock tube* pada tekanan 45 bar dan 25 bar untuk mendapatkan waktu ignisi pada berbagai temperatur. Pada temperatur awal dan rasio ekivalensi yang sama terlihat bahwa waktu tunda ignisi yang ditunjukkan oleh kenaikan temperatur yang sangat cepat akan terjadi lebih cepat pada kondisi tekanan *shock* yang lebih tinggi. Hal ini disebabkan oleh keadaan dimana kompresi gas yang lebih tinggi akan mengakibatkan kenaikan temperatur yang cepat sehingga dengan sendirinya akan tercapai ignisi yang lebih cepat.

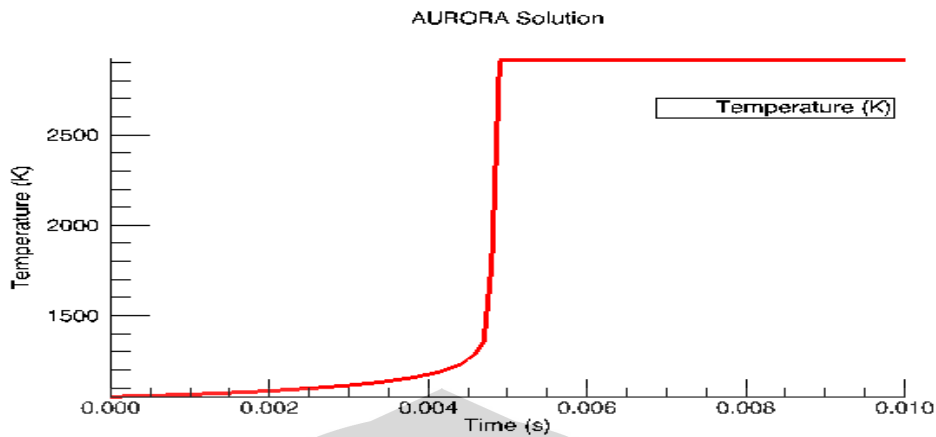


Gambar 7.1 Profil temperatur ignisi pada kondisi $T_{\text{awal}} = 1051$ K, $P = 45$ bar dan $\phi = 1.0$



Gambar 7.2. Profil temperatur ignisi pada kondisi $T_{\text{awal}} = 1051$ K, $P = 25$ bar dan $\phi = 1.0$

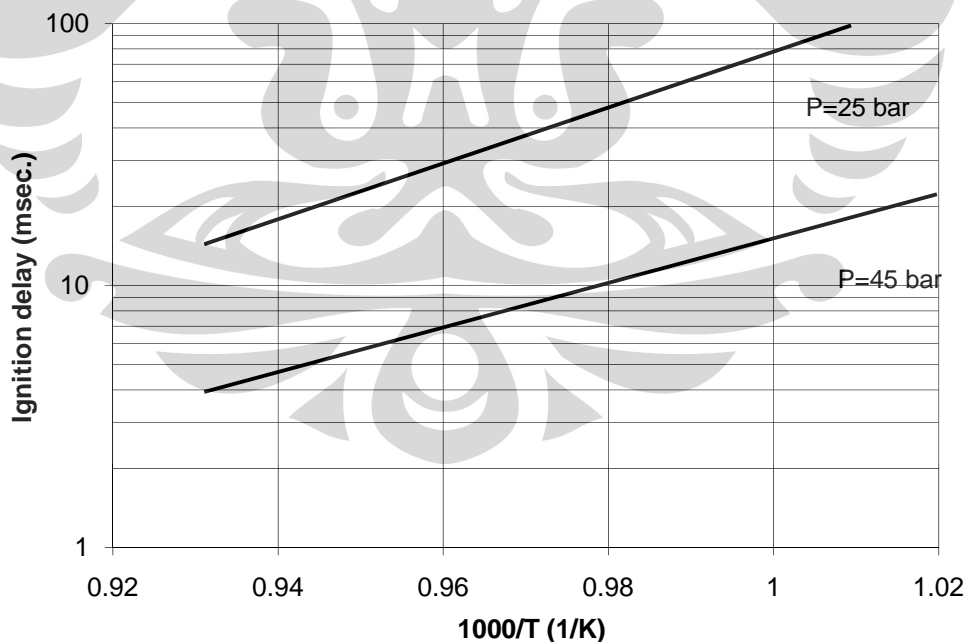
Sebagai perbandingan untuk profil temperatur 1051 K dan tekanan 45 bar tetapi pada rasio ekivalensi yang berbeda ditunjukkan oleh Gambar 7.3 dimana campuran *lean fuel* dengan $\phi = 0,5$ dikompresi cepat dalam *shock tube* menunjukkan bahwa kondisi *lean fuel* akan terignisi lebih cepat dibandingkan dengan kondisi *rich fuel*. Pada kondisi ini kandungan oksigen yang berlebih akan mempercepat reaksi pembakaran yang akan mengakibatkan pembentukan kolom radikal lebih cepat dan menyebabkan ignisi yang lebih cepat pula.



Gambar 7.3. Profil temperatur ignisi pada kondisi $T_{\text{awal}} = 1051 \text{ K}$, $P = 45 \text{ bar}$ dan $\phi = 0,5$.

7.1.1 Variasi Tekanan

Kondisi percobaan yang telah divalidasi pada tekanan 45 atm dan 25 atm dibandingkan dengan hasil perhitungan pada kondisi tekanan yang sama. Simulasi dilakukan pada kondisi rentang temperatur pada percobaan yang dilakukan oleh Davidson [5] yaitu pada temperatur 950 K sampai 1063 K. Perbandingan kedua kondisi ini dapat dilihat pada Gambar 7.1.

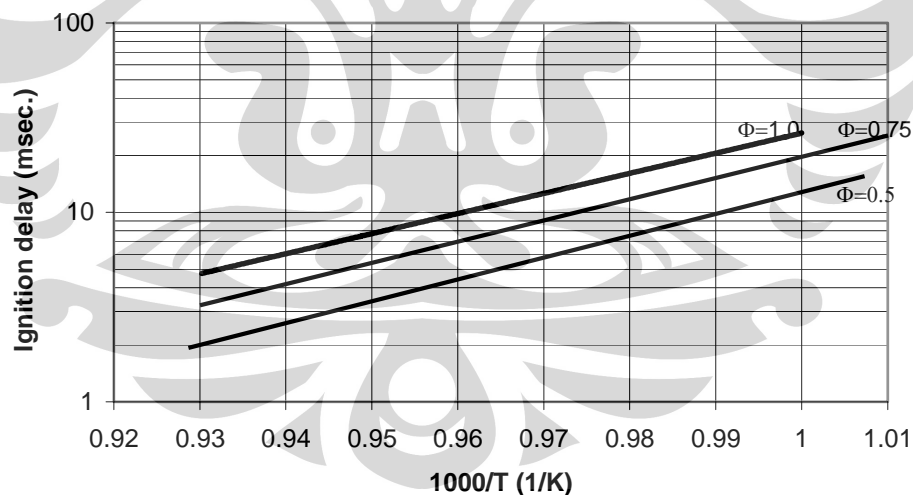


Gambar 7.4 Perbandingan *ignition delay time* pada tekanan 45 dan 25 atm. Rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0 (0,962% $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, 8,65% O_2 dan 90,38% Ar)

Pada Gambar 7.4 terlihat bahwa pada tekanan yang lebih tinggi, ignisi terjadi lebih cepat. Pada temperatur yang lebih rendah, perbedaan waktu ignisi terlihat untuk dua tekanan yang berbeda. Perbedaan tersebut makin mengecil pada kondisi temperatur yang lebih tinggi. Pada temperatur tinggi kumpulan radikal akan terbentuk dengan sangat cepat dan meningkatkan waktu tunda ignisi.

7.1.2 Variasi Rasio Ekivalensi

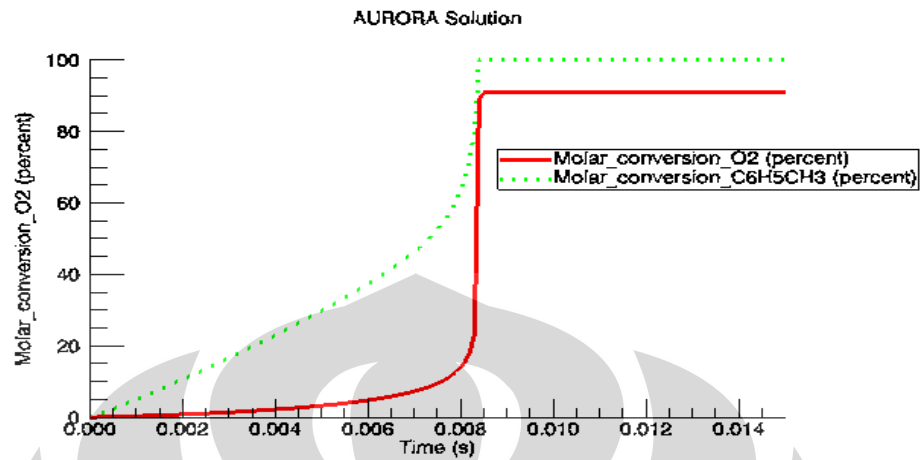
Kondisi percobaan yang telah divalidasi pada 45 bar dibandingkan untuk rasio ekivalensi 0,5 (*fuel lean*), 0,75 dan 1,0 (stoikiometrik). *Fuel lean* suatu campuran dengan kondisi kandungan bahan bakar sedikit (dibawah rasio stoikiometrik). Sedangkan stoikiometrik adalah suatu campuran dimana secara teoritis kandungan bahan bakarnya sebanding dengan jumlah oksigennya. Dalam hal *rich fuel*, dimana kandungan bahan bakar dalam suatu campurannya melebihi rasio kecukupan secara teoritis untuk jumlah keperluan oksigen. Dalam validasi ini kondisi *rich fuel* tidak digunakan. Perbandingan kedua kondisi ini dapat dilihat pada Gambar 7.5.



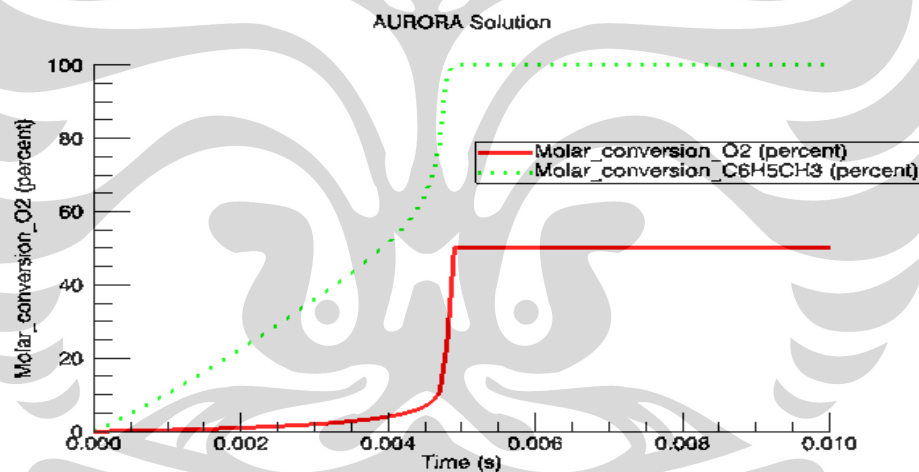
Gambar 7.5 Perbandingan *ignition delay time* pada kondisi 45 bar untuk $\phi=0,5$, 0,75 dan 1,0 dengan konsentrasi 0,962% $C_6H_5CH_3$.

Pada Gambar 7.5 untuk kondisi temperatur yang lebih rendah, terlihat bahwa waktu tunda nyala pada rasio ekivalensi 1,0 lebih tinggi dibandingkan pada rasio ekivalensi 0,5 maupun 0,75. Pada kondisi tersebut, rasio toluena terhadap

oksidator yang lebih tinggi menghasilkan kumpulan radikal lebih banyak dibandingkan rasio ekivalensi yang lebih rendah.



Gambar 7.6 Profil konsentrasi reaktan utama pada kondisi 45 bar dan temperatur 1051 K rasio ekivalensi (ϕ) = 1,0.



Gambar 7.7 Profil konsentrasi reaktan utama pada kondisi 45 bar dan temperatur 1051 K rasio ekivalensi (ϕ) = 0,5.

Profil konversi yang terlihat pada Gambar 7.6 dan 7.7 juga menunjukkan hal yang sama reaktan akan terkonversi lebih cepat pada kondisi *rasio ekivalensi* yang lebih rendah. Konversi ini akan sebanding dengan kenaikan temperatur untuk ignisi.

Dari variasi tekanan dan rasio ekivalensi di atas terlihat bahwa *ignition delay time* yang paling cepat terdapat pada kondisi tekanan yang tinggi dan rasio campuran *fuel lean*. Modifikasi dari analisis regresi yang dilakukan oleh G. Mittal



C. dan J. Sung [22] didapatkan hubungan pendekatan antara waktu tunda ignisi dalam milidetik sebagai fungsi dari konsentrasi bahan bakar, oksigen, tekanan dan temperatur dari suatu reaksi pembakaran sebagai berikut:

$$\tau_{ign} = 1,50 \cdot 10^{-12} \cdot P_c^{-2} \cdot (X_{toluen})^{-0.780} \cdot (X_{O_2})^{-1.580} \cdot \exp(30835/T_c) \quad (7.1)$$

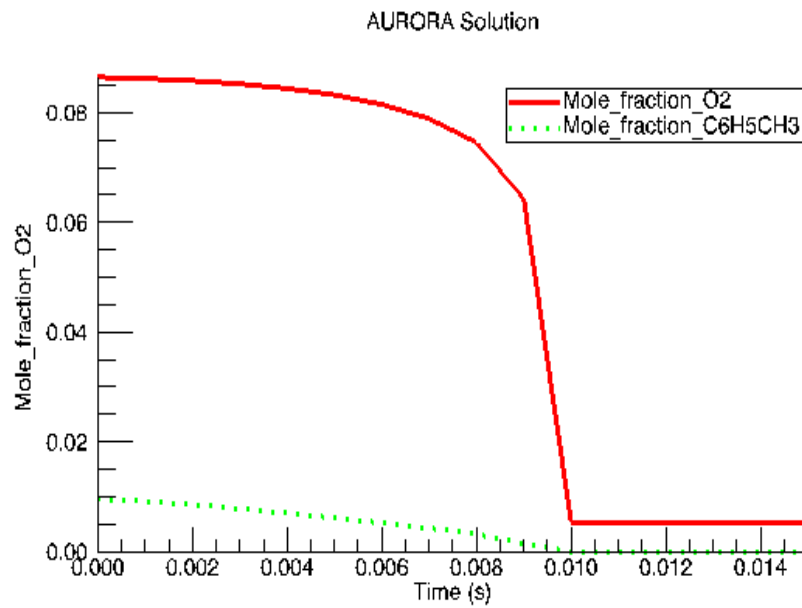
Korelasi ini masih konsisten untuk diterapkan pada data hasil simulasi dengan tingkat kesalahan sekitar +/- 12 % sebagaimana ditabelkan pada Lampiran-1. Tingkat kesalahan ini terutama disebabkan oleh ketidakpastian (*uncertainties*) dari temperature kompresi terdeduksi.

7.2 PERFECTLY STIRRED REACTOR (PSR)

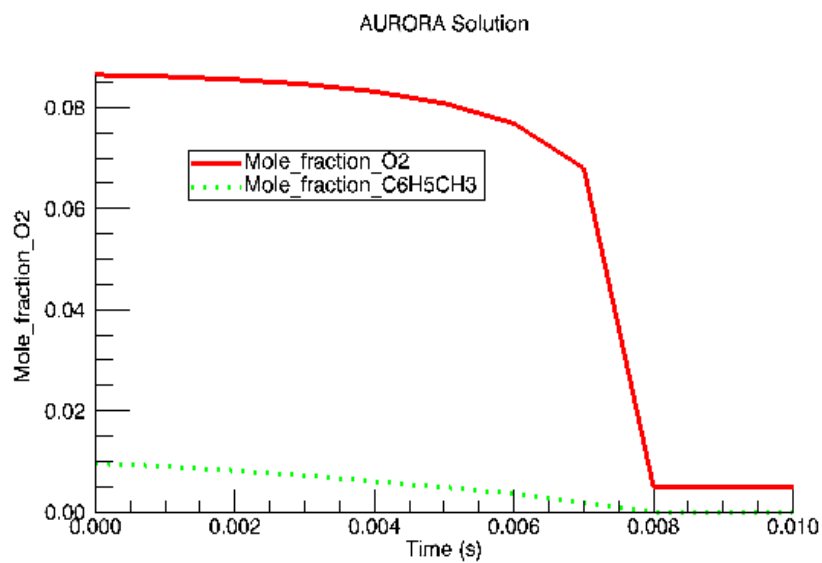
Pada simulasi dengan sistem reaktor ini, kurva perkiraan yang tertera pada Gambar 7.8-7.29 adalah berdasarkan hasil *running* program simulasi untuk memperkirakan profil parameternya. Data eksperimen untuk reaksi pembakaran yang mengaplikasikan *perfectly stirred reactor* masih sangat jarang dilakukan yang dikarenakan sistem umpan yang diterapkan adalah fase gas.

7.2.1 Variasi Tekanan

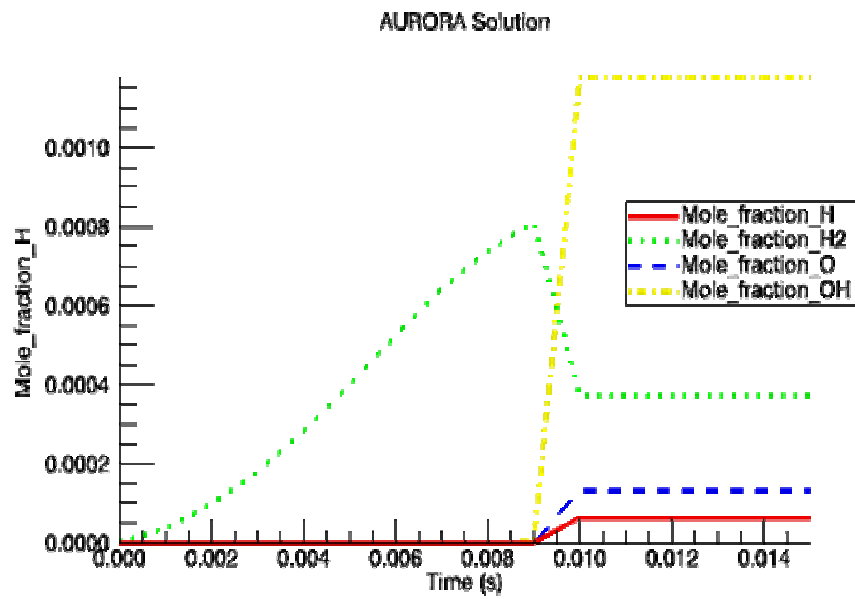
Simulasi dengan variasi tekanan adalah dilakukan pada tekanan 35 bar dan 45 bar. Hasil simulasi seperti ditunjukkan pada Gambar 7.8 – Gambar 7.15 semuanya menunjukkan bahwa produk reaksi pembakaran baik itu produk intermediat yang akan muncul sesaat maupun produk spesi stabil tetapi terkonversi kembali pada akhirnya dengan waktu tinggal yang cukup dalam reaktor akan membentuk produk akhir untuk reaksi pembakaran sempurna berupa CO₂ dan H₂O. Dari Gambar tersebut terlihat dengan adanya perbedaan tekanan operasi 10 atm akan mempercepat pencapaian waktu kondisi kesetimbangan reaksi sekitar 2 milidetik. Beberapa spesies kimia muncul relatif lebih lambat dibandingkan spesies kimia lainnya, seperti halnya spesi OH pada Gambar 7.10. Hal ini disebabkan radikal tersebut merupakan produk reaksi radikal sebelumnya yang secara kinetika memiliki affinitas reaksi yang lebih tinggi.



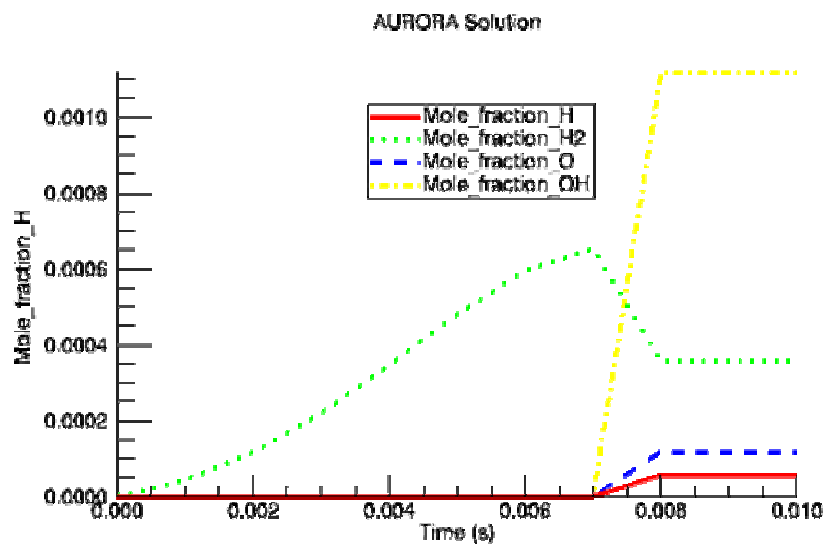
Gambar 7.8 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk O_2 dan $C_6H_5CH_3$. Kondisi penelitian: $T=1200$ K dan $\phi=1,0$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)



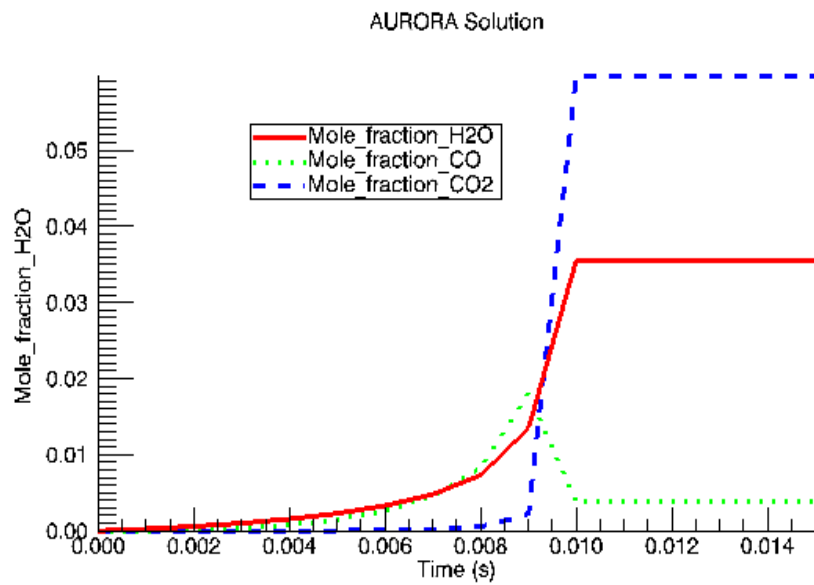
Gambar 7.9 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk O_2 dan $C_6H_5CH_3$. Kondisi penelitian: $T=1200$ K dan $\phi=1,0$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)



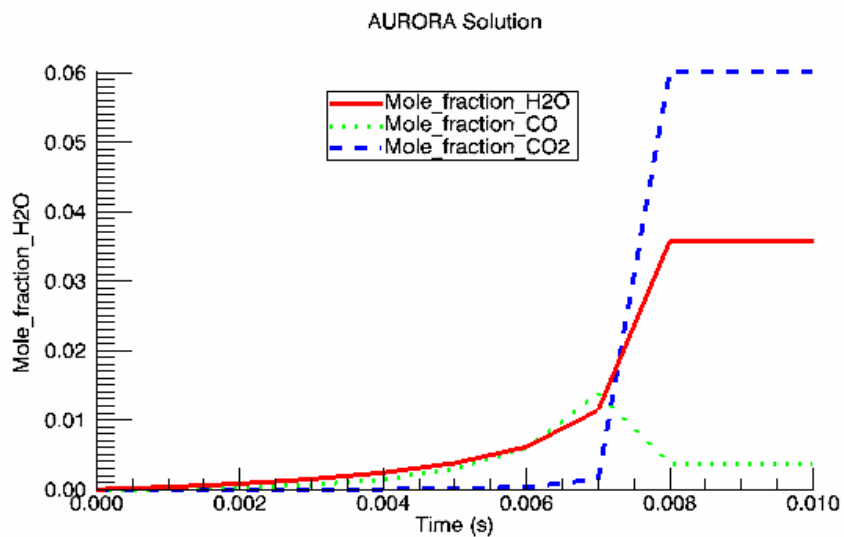
Gambar 7.10 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H, H₂O dan OH. Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)



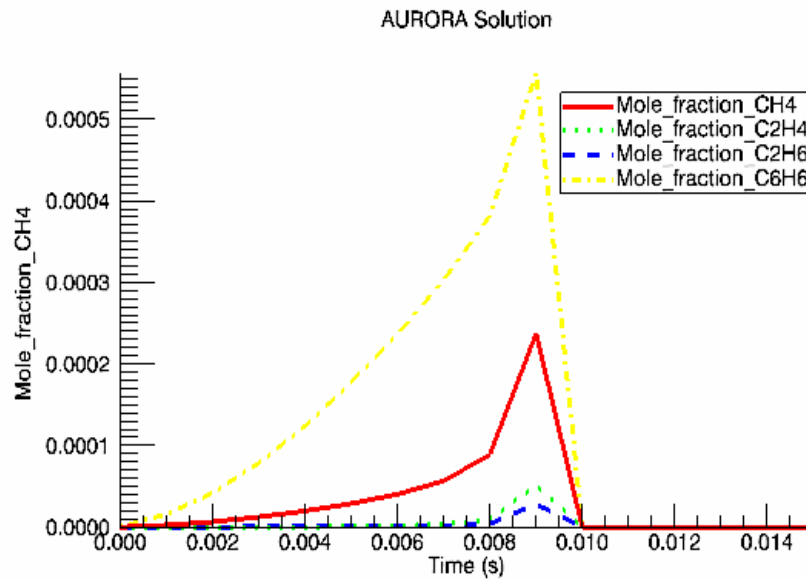
Gambar 7.11 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H, H₂O dan OH. Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)



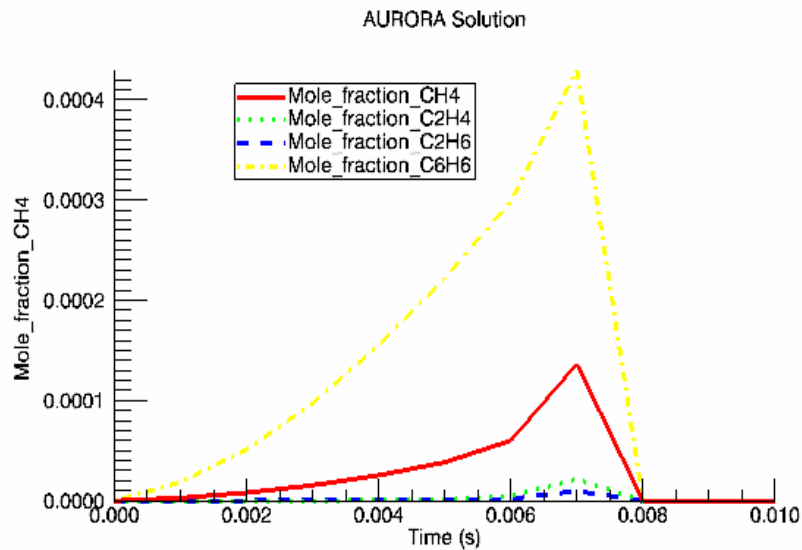
Gambar 7.12 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H₂O, CO dan CO₂. Kondisi penelitian: T=1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)



Gambar 7.13 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H₂O, CO dan CO₂. Kondisi penelitian: T=1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)



Gambar 7.14 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk CH_4 , C_2H_4 dan C_2H_6 dan C_6H_6 . Kondisi penelitian: $T=1200\text{ K}$ dan $\phi=1,0$ (0,962% $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)

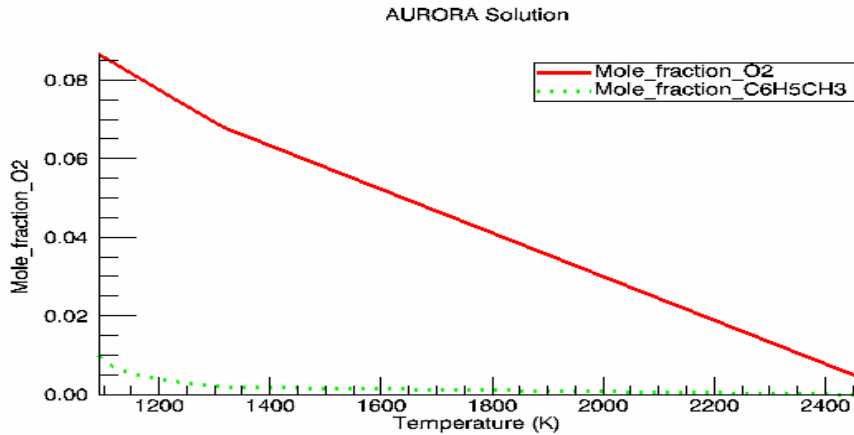


Gambar 7.15 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk CH_4 , C_2H_4 dan C_2H_6 dan C_6H_6 . Kondisi penelitian: $T=1200\text{ K}$ dan $\phi=1,0$ (0,962% $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)

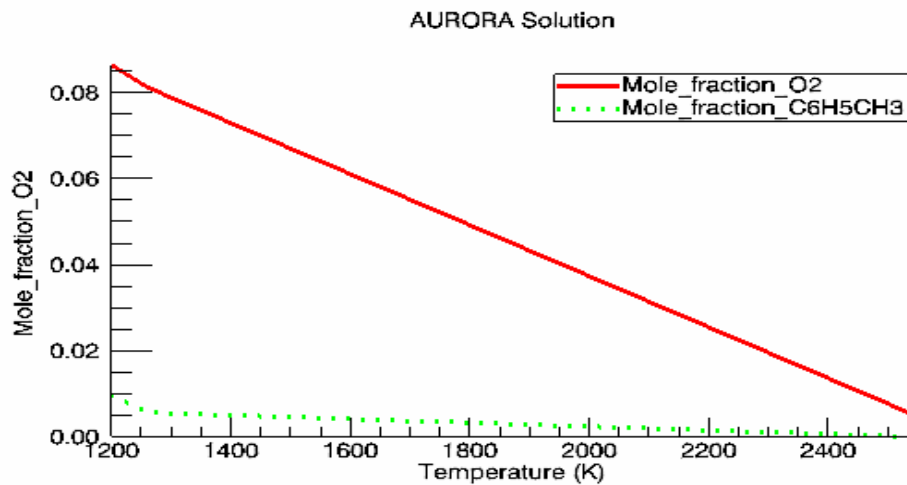
7.2.2 Variasi Temperatur

Untuk simulasi dengan variasi temperatur ini dilakukan pada dua kondisi yaitu untuk temperatur awal 1200 K dan 1190 K dan pada tekanan tetap 45 bar

dan $\phi=1,0$ untuk melanjutkan hasil validasi menurut percobaan yang telah dilakukan oleh Brezinsky dan Dryer[2] . Profil simulasi ini ditunjukkan pada Gambar 7.16 sampai 7.23.

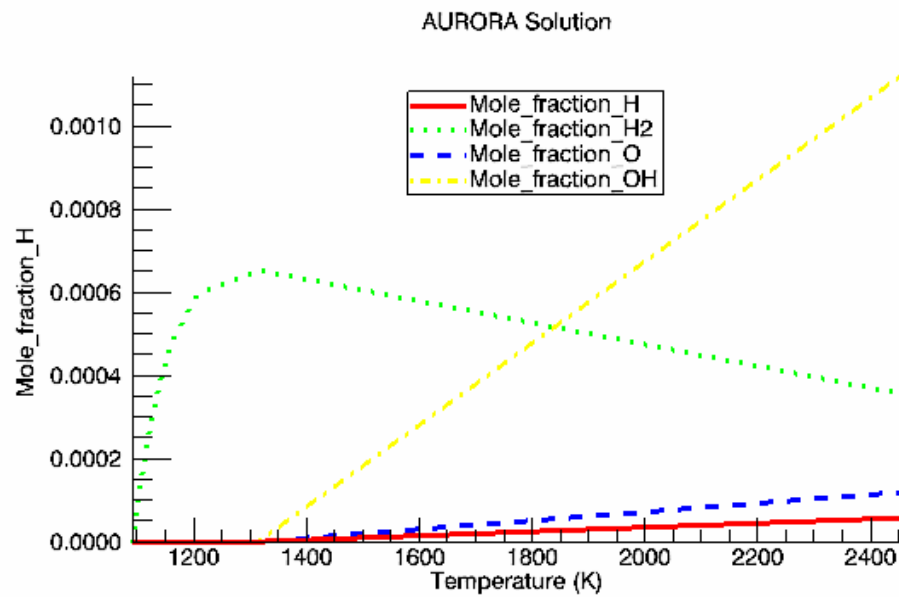


Gambar 7.16 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk O₂ dan C₆H₅CH₃ . Kondisi penelitian: T_{awal}=1200 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)

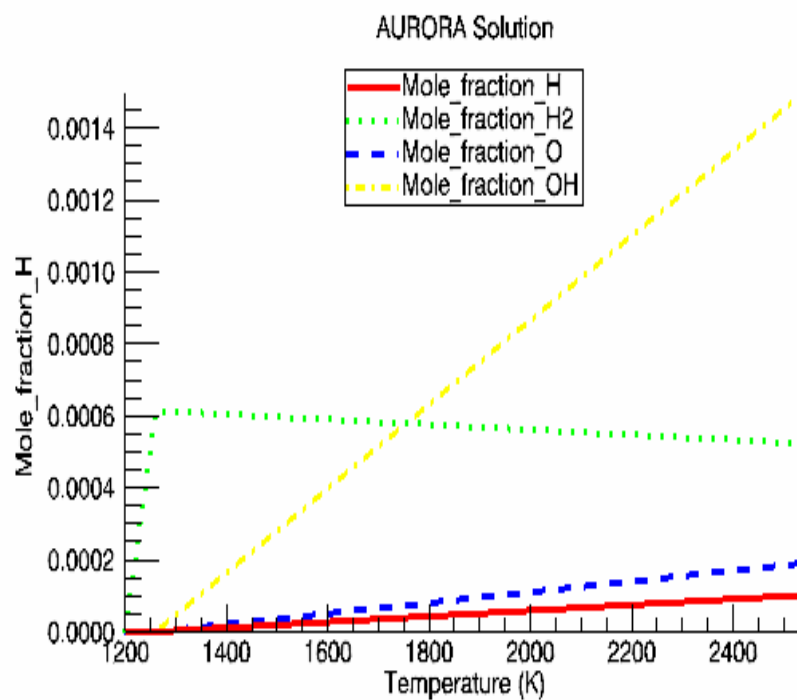


Gambar 7.17 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk O₂ dan C₆H₅CH₃ . Kondisi penelitian: T_{awal}=1092 K dan $\phi=1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)

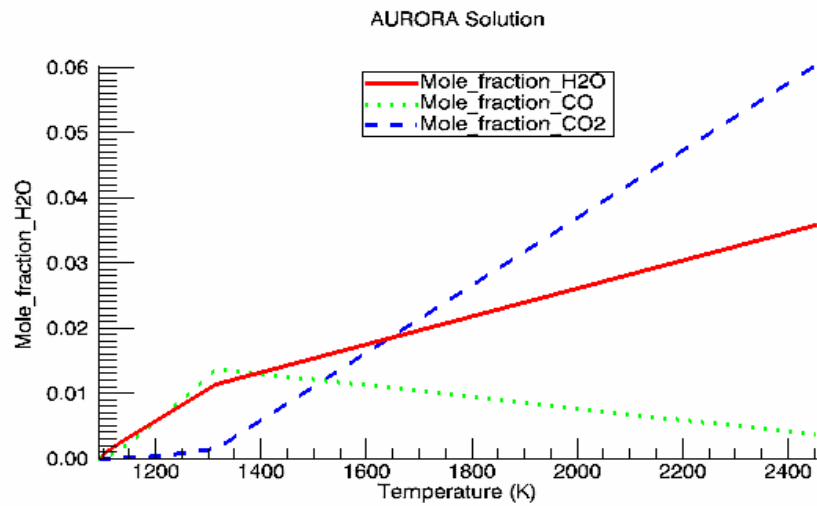
Dengan melihat kondisi perbedaan temperatur yang ada, beberapa spesi kimia menunjukkan reaksi sensitif seperti halnya spesi H₂, CO, CH₄, C₂H₂, yang menunjukkan perubahan kecepatan reaksi yang cukup signifikan. Sedangkan untuk beberapa spesies kimia seperti C₆H₅OCH₃, C₂H₄, C₂H₆ dan C₆H₆ menunjukkan tidak terlalu peka terhadap sedikit perubahan temperatur.



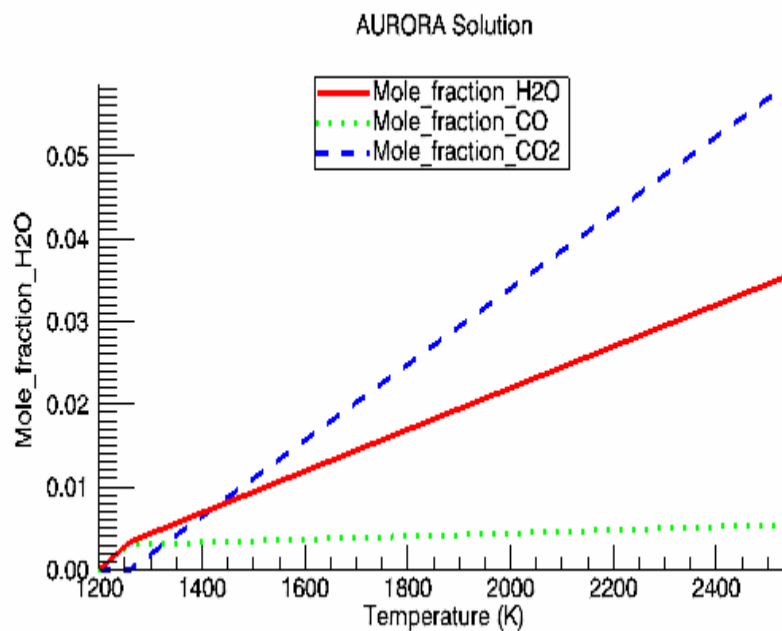
Gambar 7.18 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H, H₂O dan OH. Kondisi penelitian : $T_{\text{awal}} = 1200$ K dan $\phi = 1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)



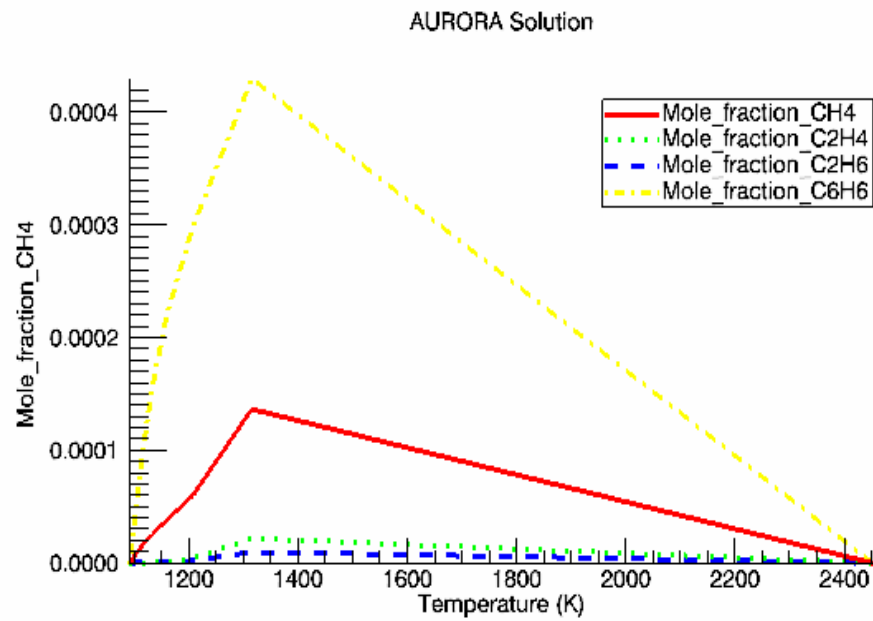
Gambar 7.19 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H, H₂O dan OH. Kondisi penelitian : $T_{\text{awal}} = 1092$ K dan $\phi = 1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)



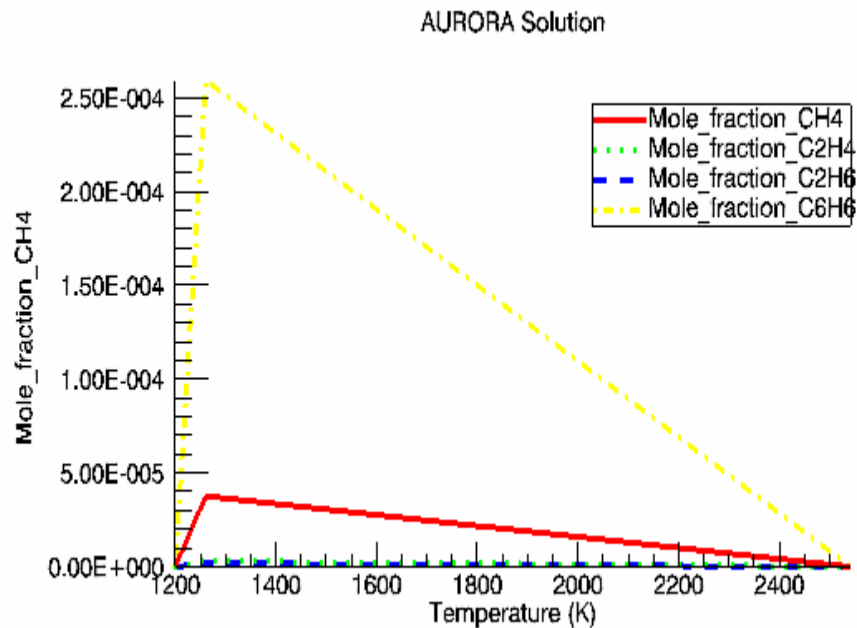
Gambar 7.20 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H₂O, CO dan CO₂. Kondisi penelitian: $T_{awal}=1200$ K dan $\phi=1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)



Gambar 7.21 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk H₂O, CO dan CO₂. Kondisi penelitian: $T_{awal}=1092$ K dan $\phi=1,0$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 8,64% O₂ dan 90,38% Ar)



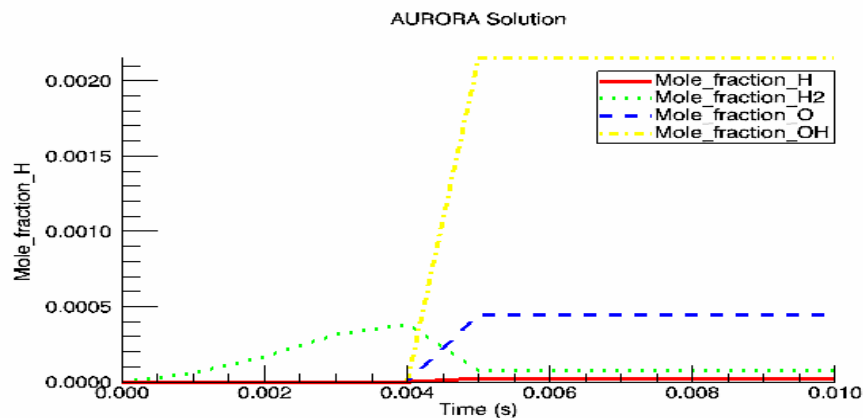
Gambar 7.22 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk CH_4 , C_2H_4 dan C_2H_6 dan C_6H_6 . Kondisi penelitian: $T_{\text{awal}}=1200$ K dan $\phi=1,0$ (0,962% $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)



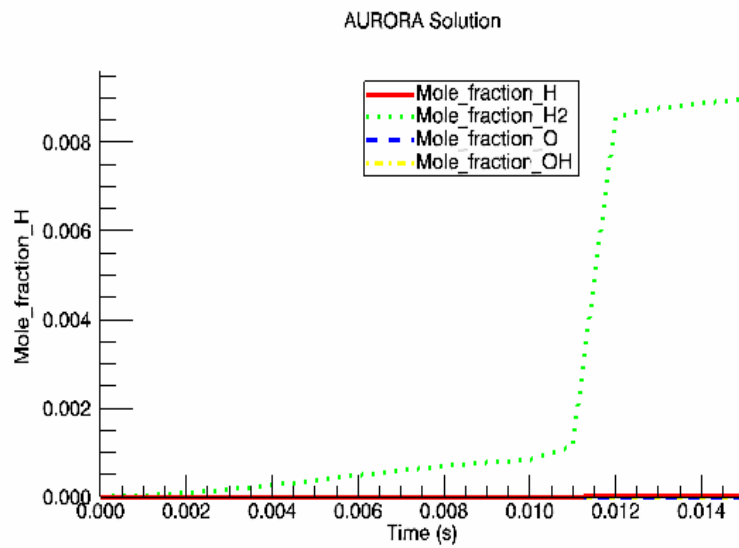
Gambar 7.23 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk CH_4 , C_2H_4 dan C_2H_6 dan C_6H_6 . Kondisi penelitian: $T_{\text{awal}}=1092$ K dan $\phi=1,0$ (0,962% $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$, 8,64% O_2 dan 90,38% Ar)

7.2.3 Variasi Rasio Ekivalensi dan Temperatur.

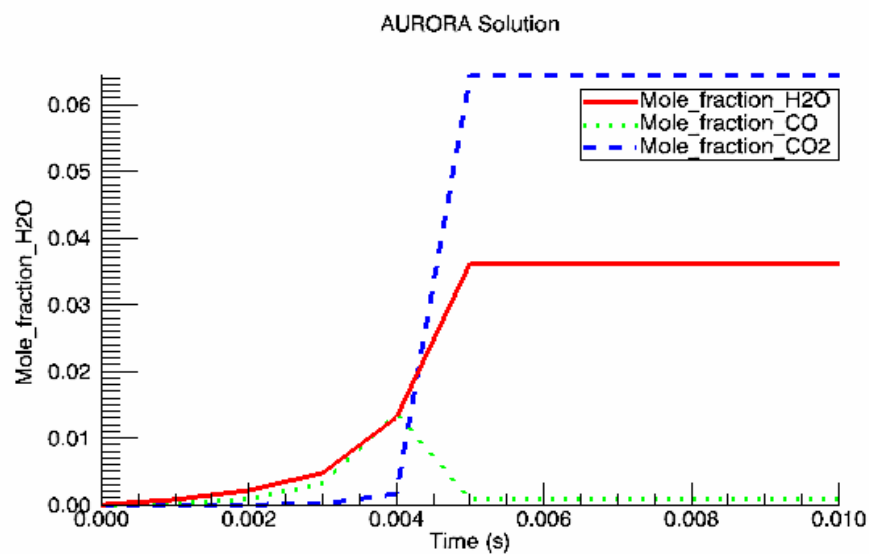
Simulasi untuk sistem *Perfectly Stirred Reactor (PSR)* sebagaimana dijelaskan sebelumnya adalah hanya dimaksudkan sebagai perkiraan dengan menggunakan *output Software*, dengan membandingkan perubahan dari parameter variasi rasio ekivalensi dan temperatur untuk dibandingkan dengan hasil percobaan yang sudah divalidasi tetapi menggunakan sistem reaktor *plug flow*. sebagaimana tersaji pada Bab 5 untuk Gambar 5.7 – 5.20 yang sesuai dengan tekanan 35 bar dibandingkan dengan hasil perhitungan dengan diterapkannya perubahan rasio ekivalensi (ϕ) menjadi *fuel lean* pada sistem reaktor *PSR*. Hasil simulasi dengan kondisi ini dapat dilihat pada Gambar 7.24 – 7.28 dimana dalam hal kecepatan reaksi bisa dilihat bahwa pengaruh rasio ekivalensi (ϕ) adalah lebih dominan dibandingkan dengan temperatur.



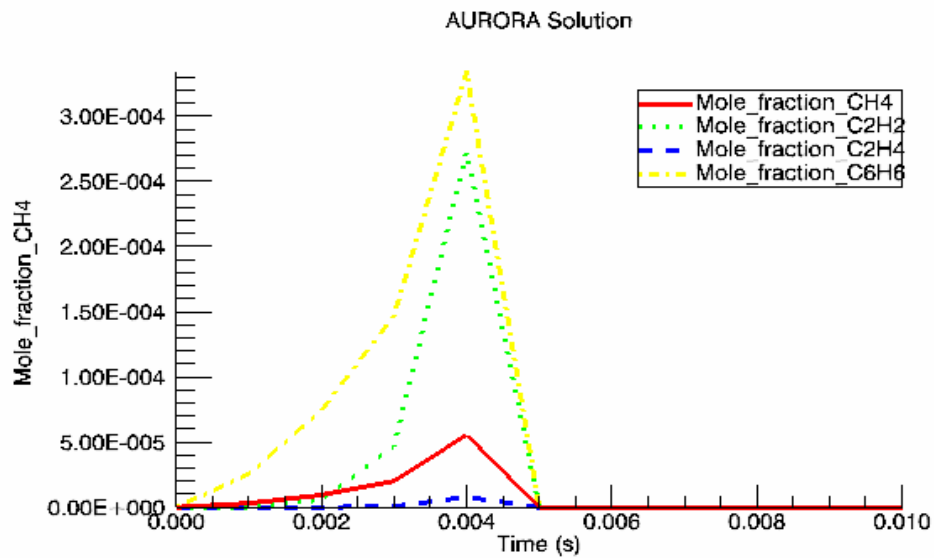
Gambar 7.24 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H, H₂O dan OH. Kondisi penelitian : T = 1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 17,30% O₂ dan 81,72% Ar)



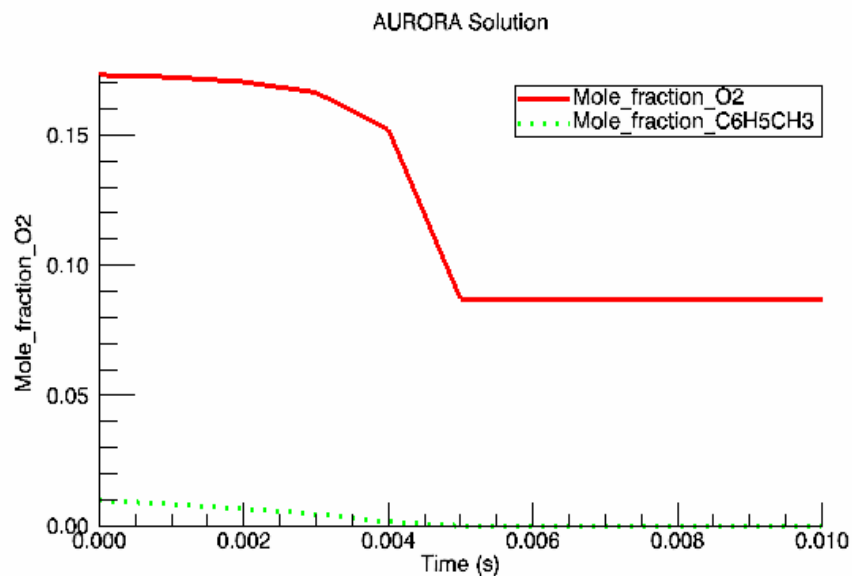
Gambar 7.25 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H, H₂O dan OH. Kondisi penelitian : T = 1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 17,30% O₂ dan 81,72% Ar)



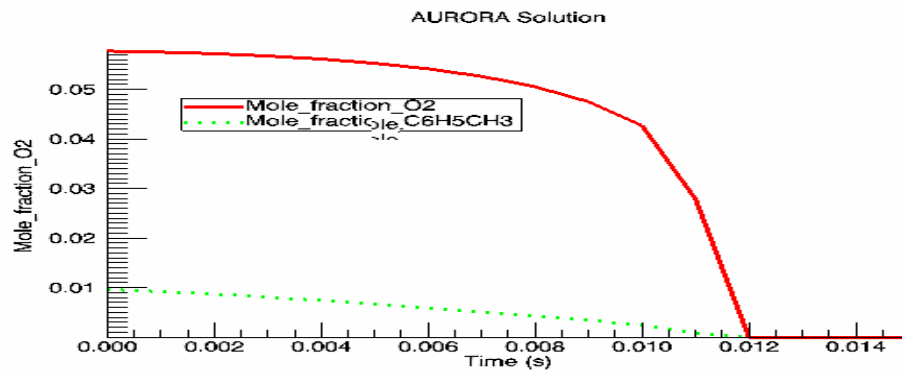
Gambar 7.26 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk H₂O, CO dan CO₂. Kondisi penelitian: T=1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 17,30% O₂ dan 81,72% Ar)



Gambar 7.27 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk CH₄, C₂H₄ dan C₂H₆ dan C₆H₆. Kondisi penelitian: T_{awal} = 1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 17,30% O₂ dan 81,72% Ar)



Gambar 7.28 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 35 atm untuk O₂ dan C₆H₅CH₃. Kondisi penelitian: T_{awal} = 1092 K dan $\phi = 0,5$ (0,962% C₆H₅OCH₃, 17,30% O₂ dan 81,72% Ar)



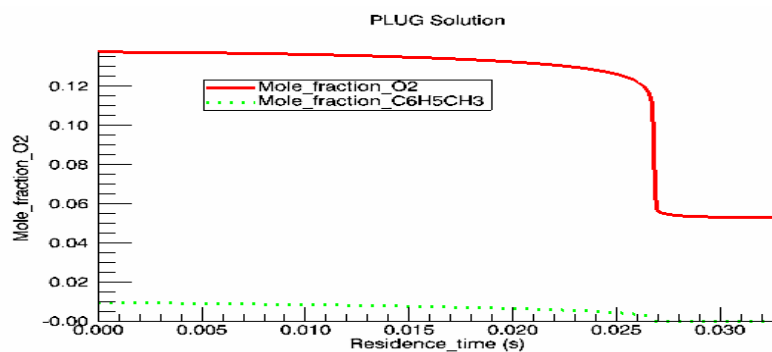
Gambar 7.29 Perbandingan profil konsentrasi transien spesi pada kondisi 45 atm untuk O_2 dan $C_6H_5CH_3$. Kondisi penelitian: $T_{awal}=1092$ K dan $\phi = 1,0$ (0,962% $C_6H_5OCH_3$, 17,30% O_2 dan 81,72,38% Ar)

7.3 PLUG FLOW REACTOR (PFR)

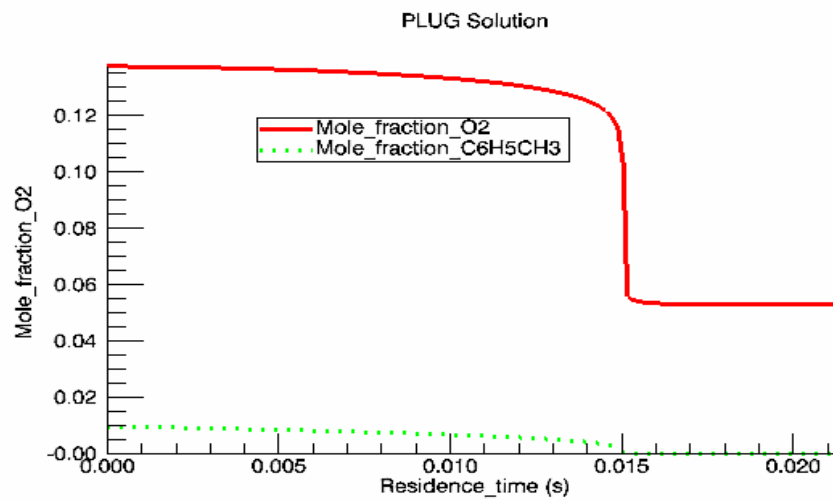
Pada simulasi ini digunakan hasil validasi yang menunjukkan kesesuaian yang cukup baik terhadap data percobaan di *flow reactor* dengan membandingkan data percobaan yang diambil dari Brezinsky dan Dryer [2]. Hasil validasi ini kemudian mengalami perubahan kondisi percobaan pada temperatur, tekanan dan rasio ekivalensi.

7.3.1 Variasi Tekanan

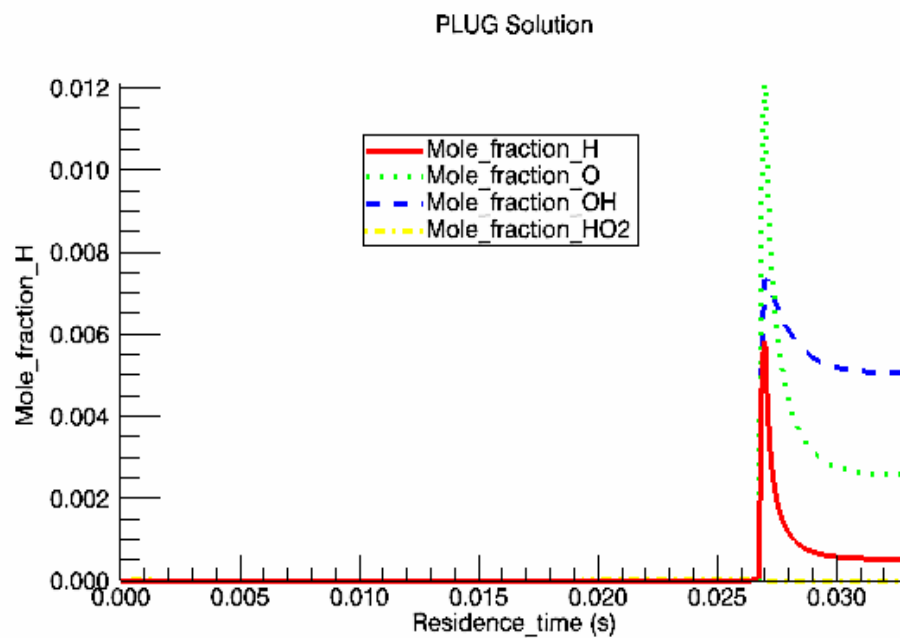
Kondisi percobaan yang telah divalidasi pada 1 atm dibandingkan dengan hasil perhitungan tekanan sistem hingga 2 atm, yang dapat dilihat pada Gambar 7.30 – 7.39.



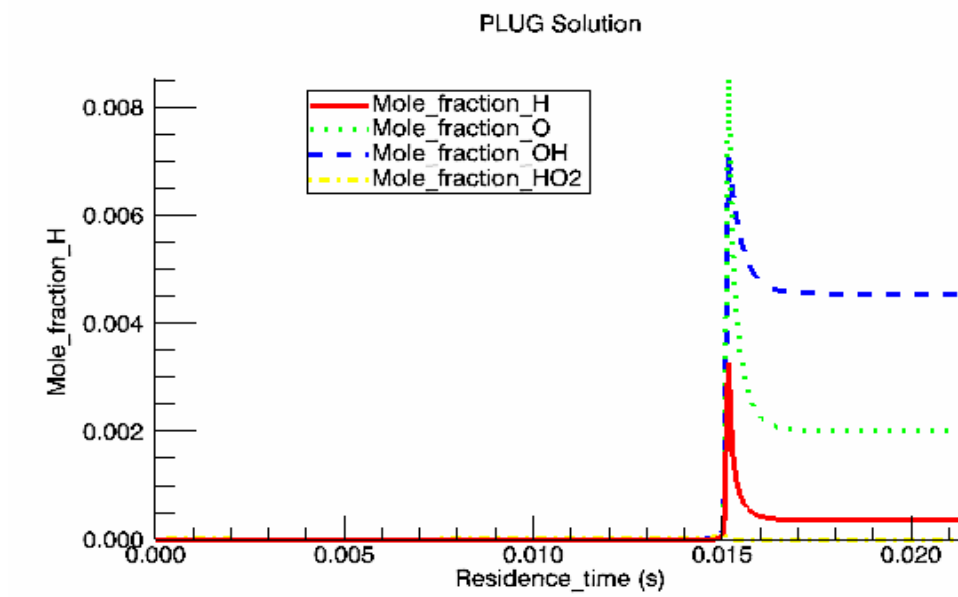
Gambar 7.30 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk $C_6H_5CH_3$ dan O_2 . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar)



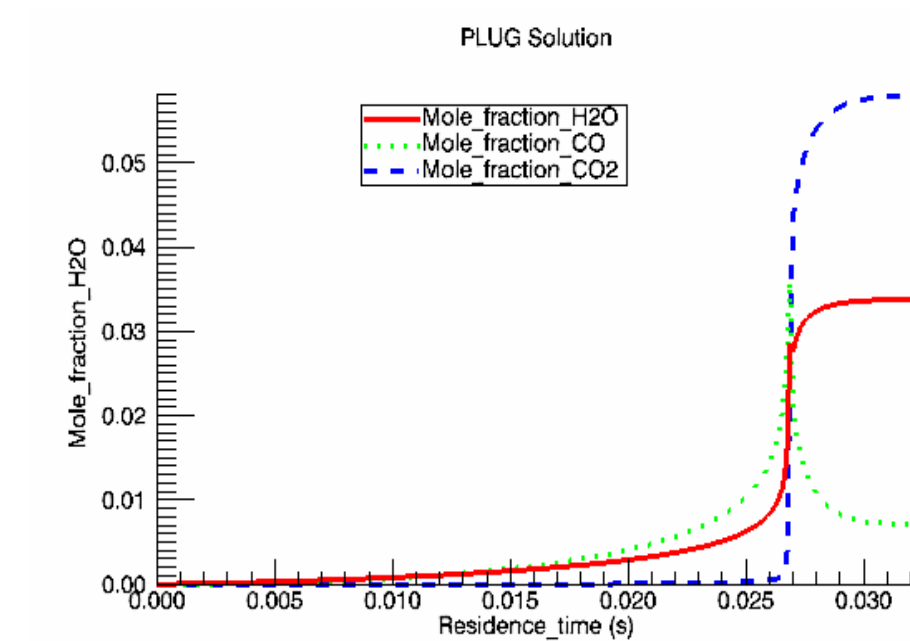
Gambar 7.31 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 2 atm untuk $C_6H_5CH_3$ dan O_2 . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar)



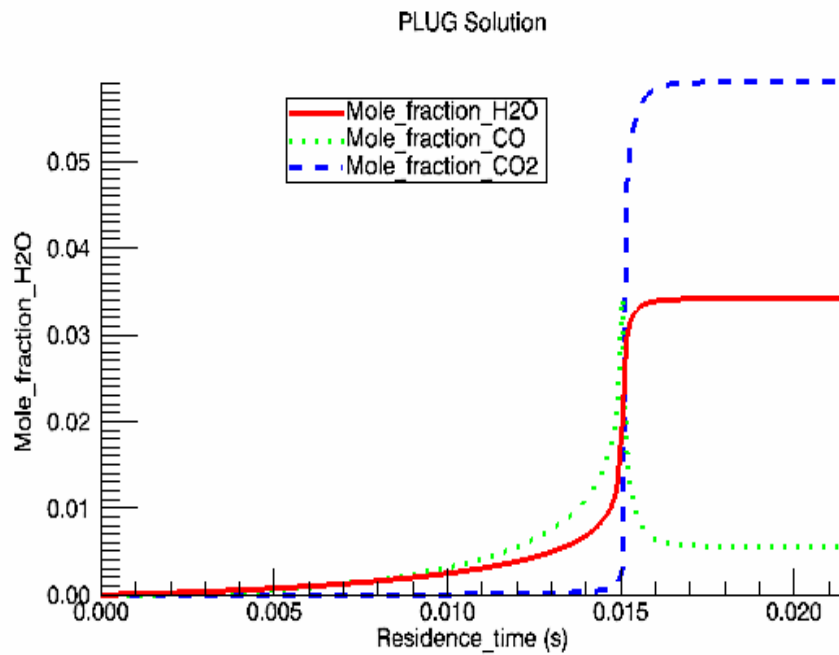
Gambar 7.32 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk H, O, OH, HO₂. Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar)



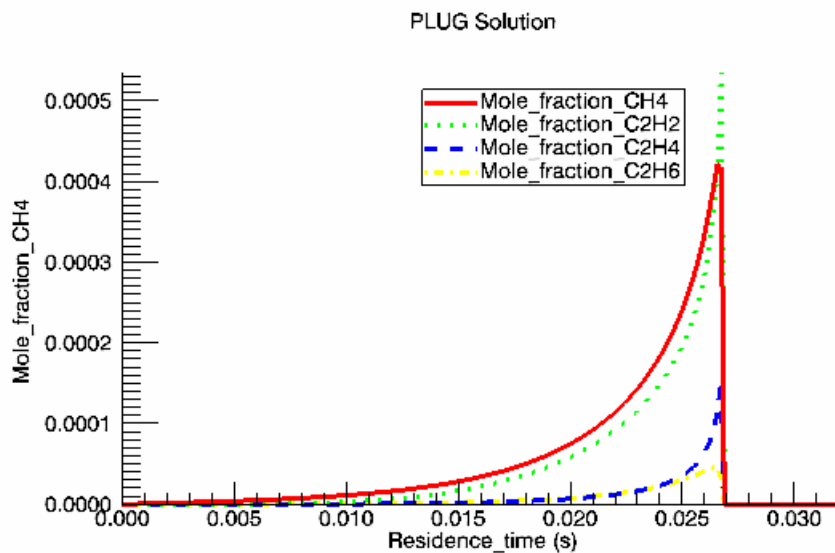
Gambar 7.33 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 2 atm untuk H, O, OH, HO₂. Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C₆H₅CH₃, 13,7% O₂ dan 85,295% Ar)



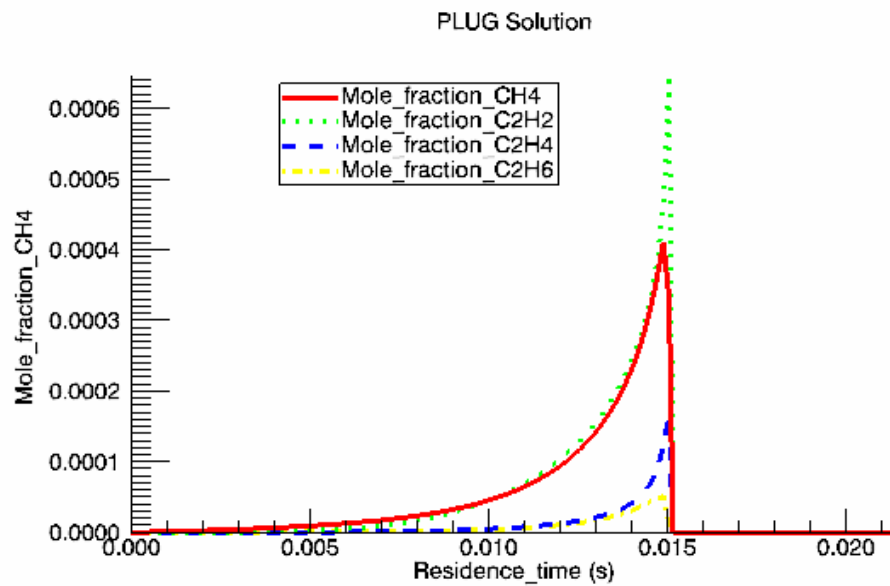
Gambar 7.34 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk CO₂, CO, H₂O. Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C₆H₅CH₃, 13,7% O₂ dan 85,295% Ar)



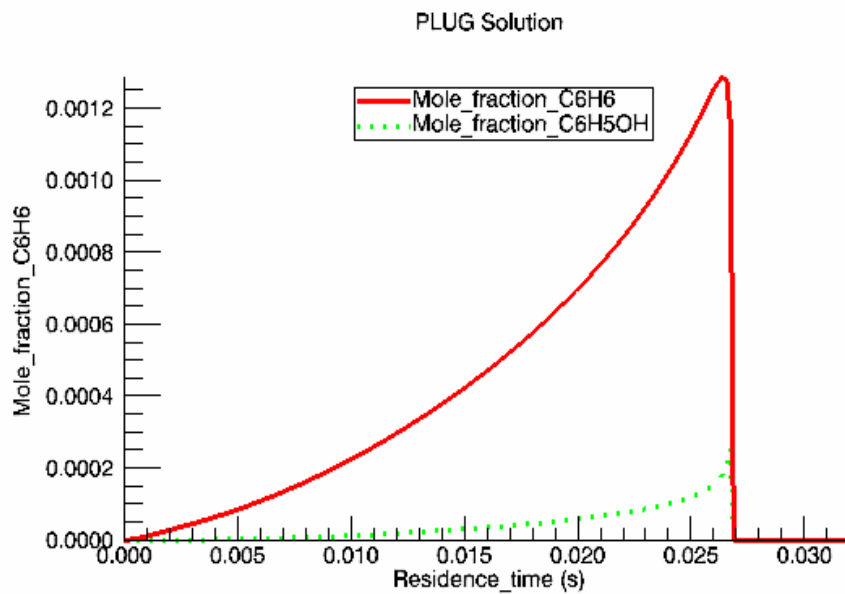
Gambar 7.35 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 2 atm untuk CO₂, CO, H₂O. Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C₆H₅CH₃, 13,7% O₂ dan 85,295% Ar)



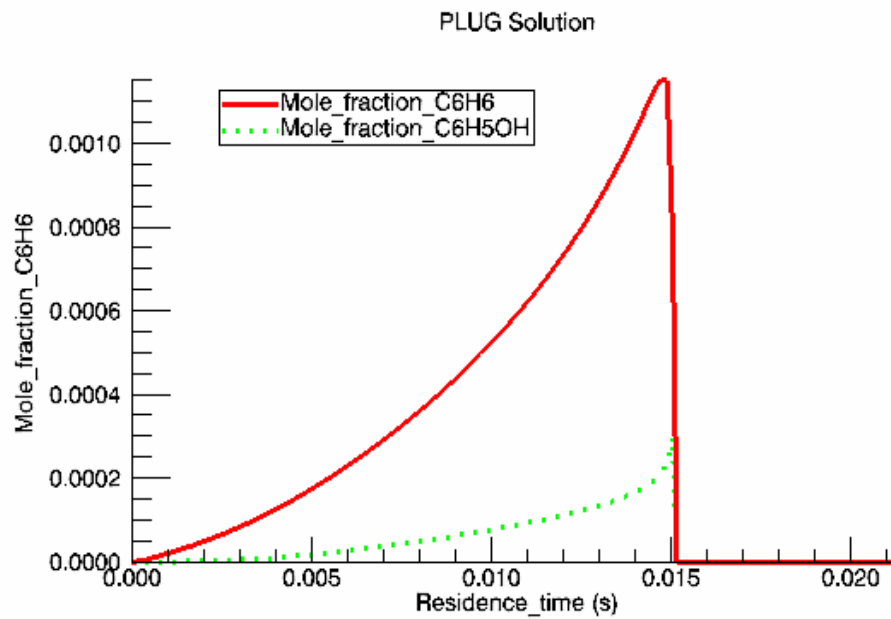
Gambar 7.36 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk CH₄, C₂H₂, C₂H₄ dan C₂H₆. Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C₆H₅CH₃, 13,7% O₂ dan 85,295% Ar)



Gambar 7.37 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 2 atm untuk CH₄, C₂H₂, C₂H₄ dan C₂H₆. Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C₆H₅CH₃, 13,7% O₂ dan 85,295% Ar)

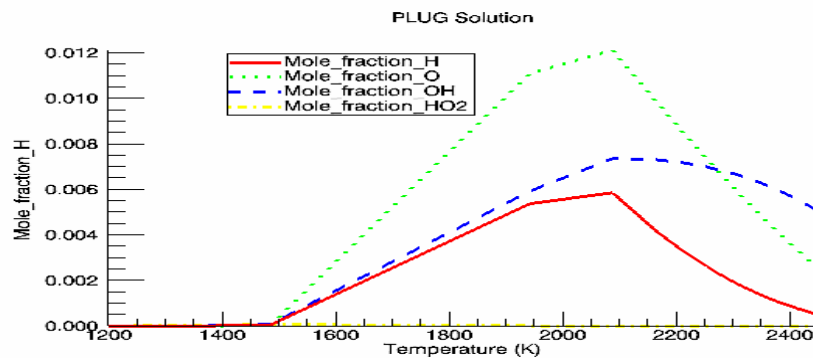


Gambar 7.38 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk C₆H₆ dan C₆H₅OH. Kondisi penelitian : T = 1200 K dan $\phi = 0,63$ (0,962% C₆H₅CH₃, 13,7% O₂ dan 85,295% Ar)

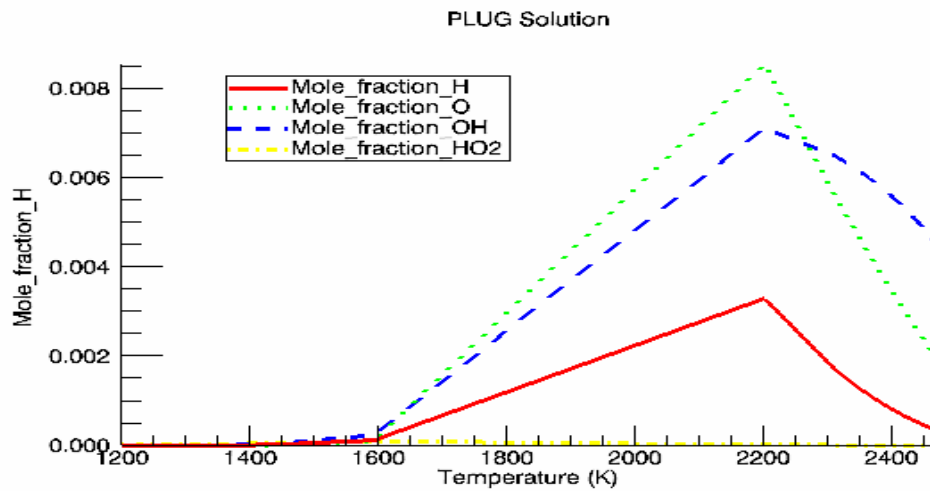


Gambar 7.39 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 2 atm untuk C_6H_6 dan C_6H_5OH . Kondisi penelitian : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar)

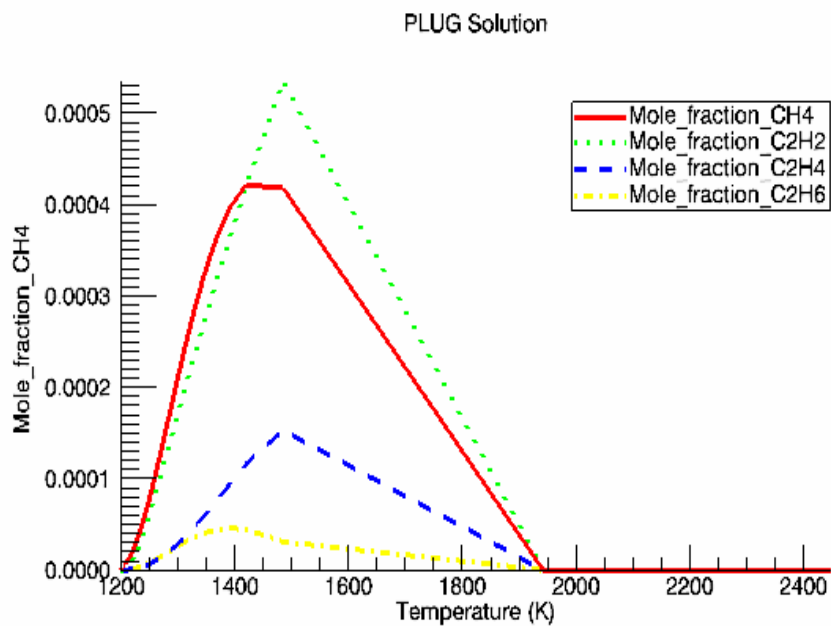
Dari Gambar 7.30 – 7.39 terlihat bahwa dengan perbedaan operasi tekanan antara 1 atm dan 2 atm akan menimbulkan dampak perubahan pada kecepatan reaksi pembakaran secara keseluruhan dengan perbedaan 12 milidetik. Produk utama reaksi pembakaran berupa CO , CO_2 dan H_2O akan meningkat konsentrasinya saat produk intermediate reaksi pembakaran mulai habis terkonversi sebagaimana terlihat salah satunya pada Gambar 7.36 dan 7.37. Sedangkan perubahan tekanan terhadap profil temperatur reaksi beberapa spesies menunjukkan perubahan konversi yang lebih signifikan. Hal ini bisa dilihat pada Gambar 7.40– 7.45.



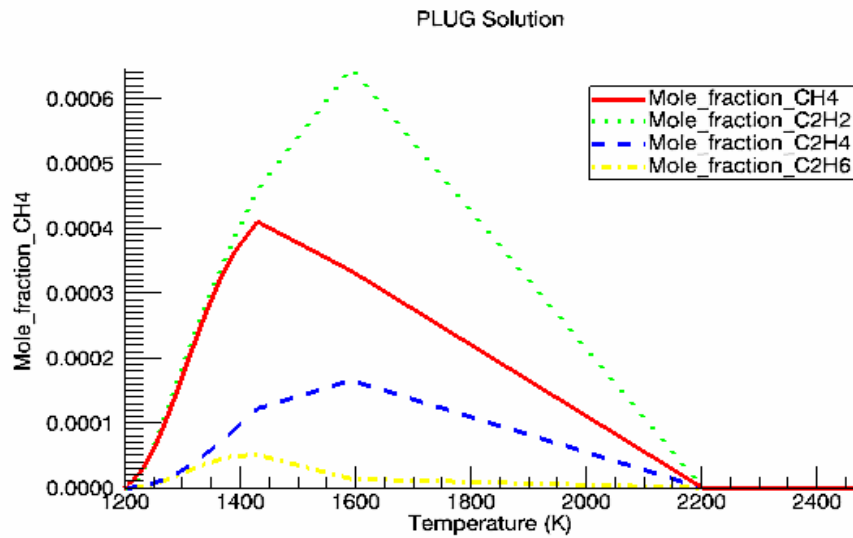
Gambar 7.40 Perbandingan profil temperatur reaksi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar)



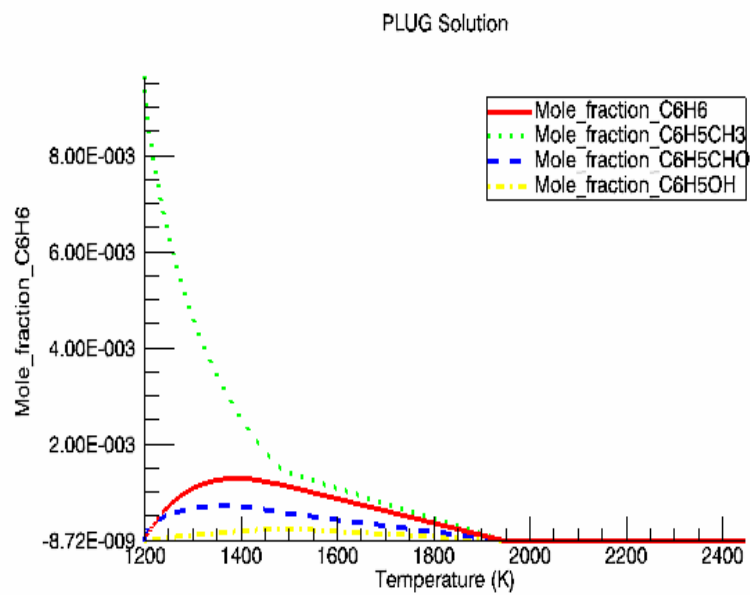
Gambar 7.41 Perbandingan profil temperatur reaksi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar)



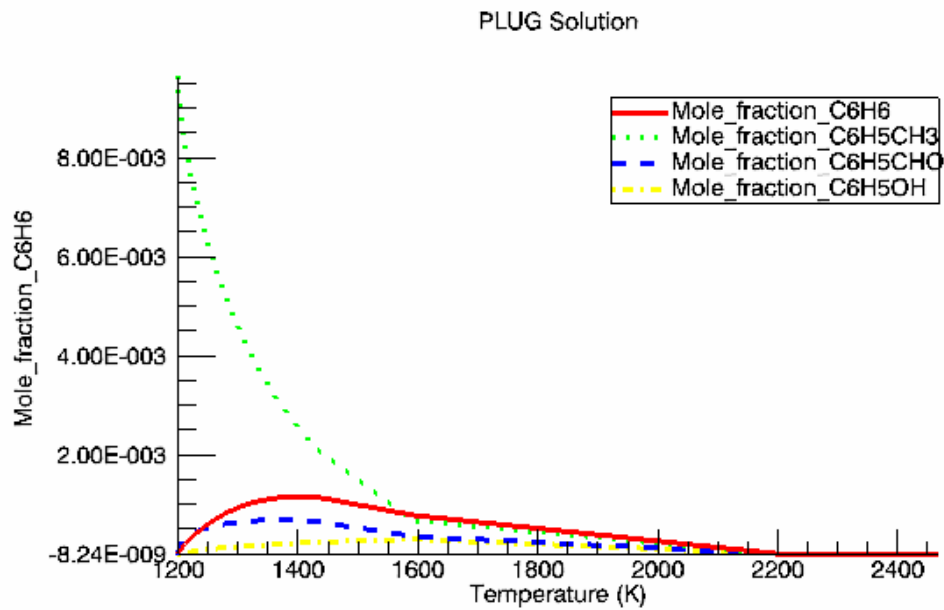
Gambar 7.42 Perbandingan profil temperatur reaksi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar)



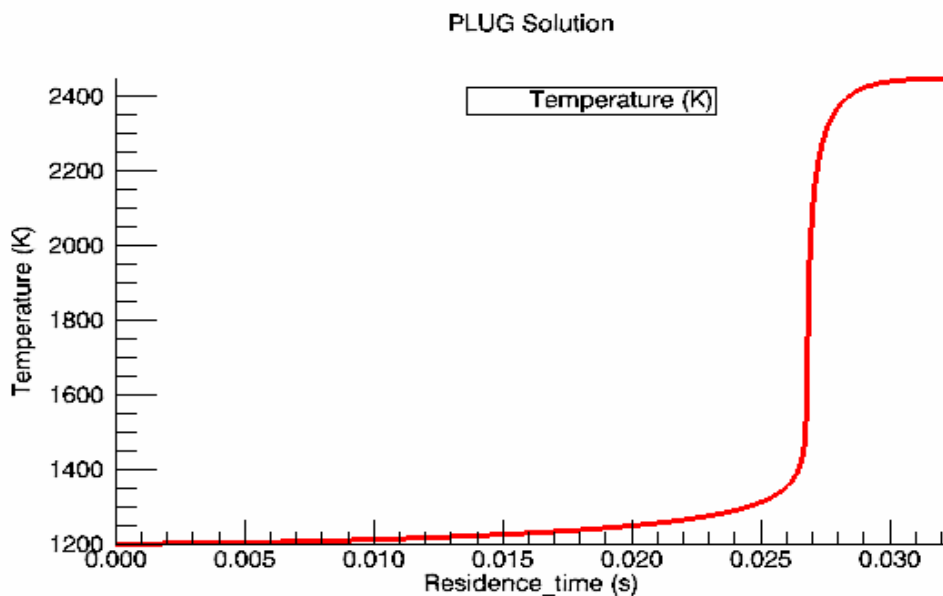
Gambar 7.43 Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada *flow reactor* pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar).



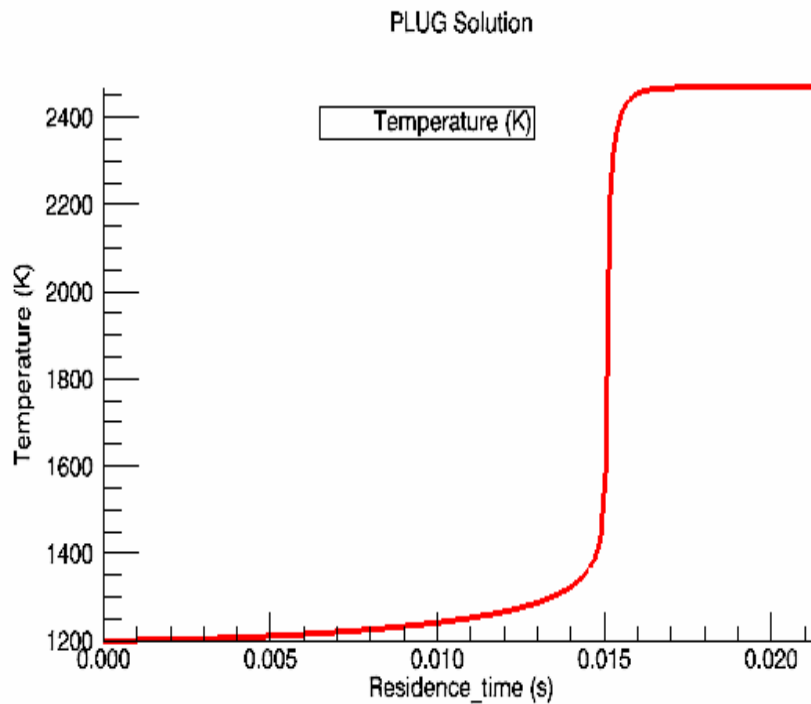
Gambar 7.44 Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada *flow reactor* pada kondisi 1 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar).



Gambar 7.45 Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada *flow reactor* pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar).



Gambar 7.46 Perbandingan profil temperatur ignisi pada *flow reactor* pada kondisi 1 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar).

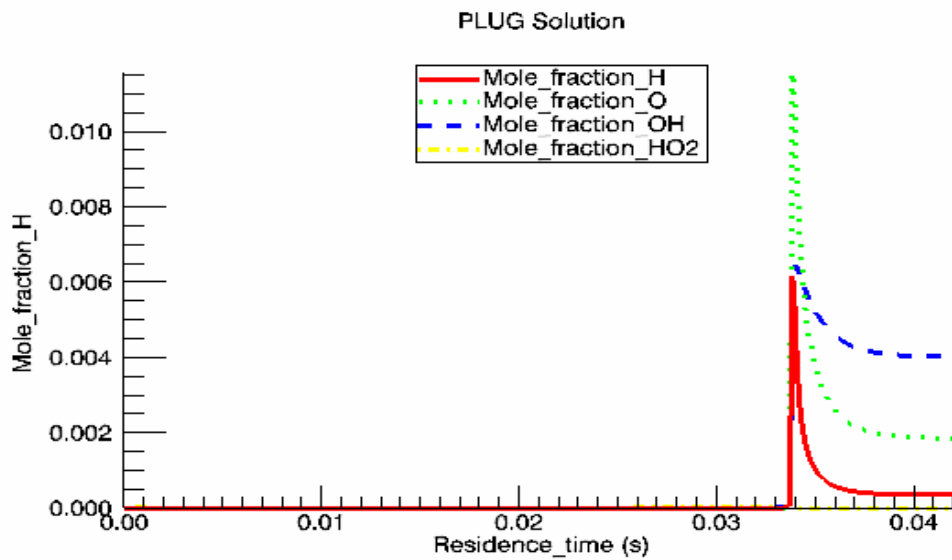


Gambar 7.47 Perbandingan profil temperatur rignisi pada *flow reactor* pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1200$ K dan $\phi = 0,63$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 13,7% O_2 dan 85,295% Ar).

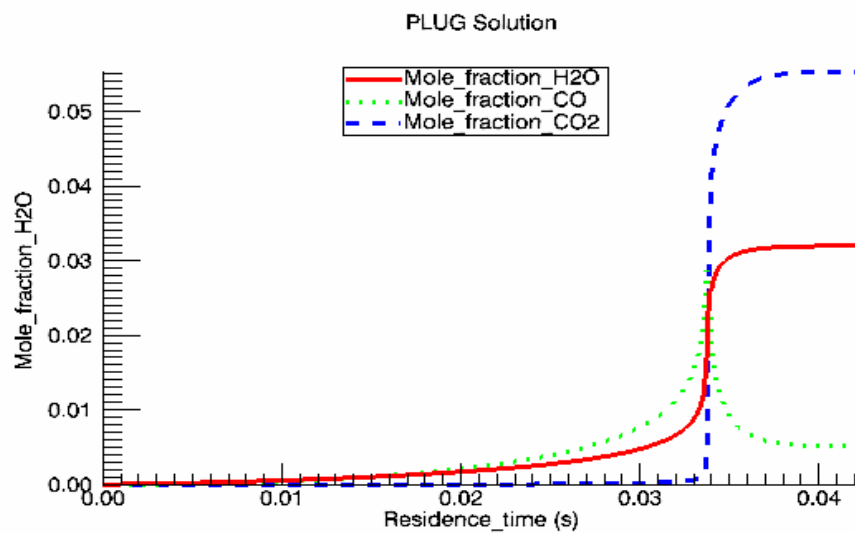
Pada kondisi tekanan sistem yang lebih tinggi, konsentrasi CO , CO_2 dan H_2O meningkat. Hal ini menyebabkan turunnya konsentrasi $C_6H_5CH_3$ dan H_2 yang teroksidasi menjadi ketiga spesi tersebut. Sedangkan untuk kecepatan ignisi, seperti ditunjukkan oleh Gambar 7.46-7.47 terlihat bahwa pada tekanan operasi yang lebih tinggi, dengan kondisi parameter lainnya sama, tekanan lebih tinggi akan menginduksi terjadinya ignisi lebih cepat.

7.3.2 Variasi Rasio ekivalensi dan Temperatur

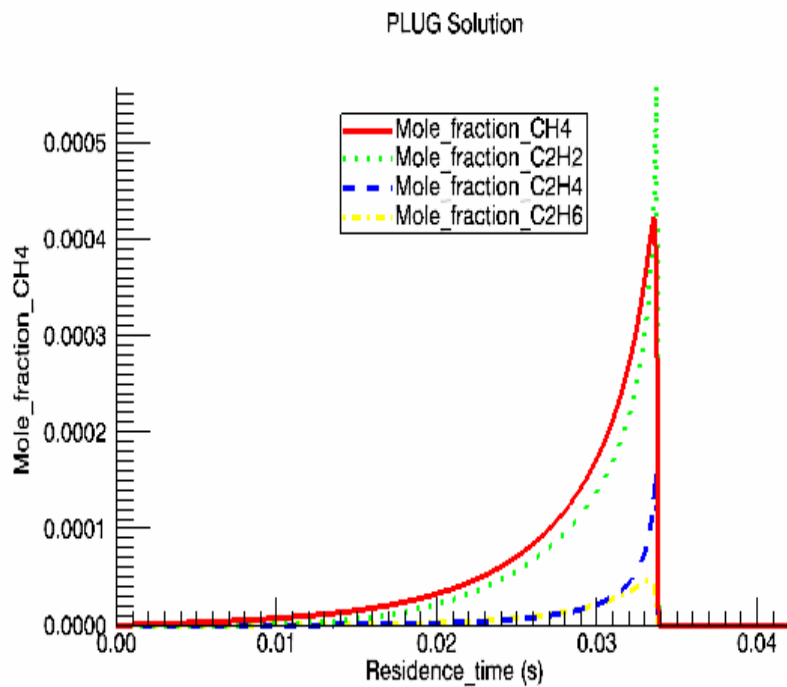
Kondisi percobaan yang telah divalidasi pada 1200 K dengan *rasio ekivalensi* 0,63 dibandingkan dengan hasil perhitungan pada temperatur 1190 K dan *rasio ekivalensin* 1,4 Gambar 7.49 – 7.56. Seperti halnya simulasi untuk model *Perfectly Stirred Reactor (PSR)*, pada model *Plug Flow Reactor (PFR)* pun menunjukkan kondisi *rasio ekivalensi* yang lebih rendah akan mempercepat tercapainya kondisi reaksi yang setimbang namun dengan beda waktu yang lebih kecil sekitar 6 milidetik.



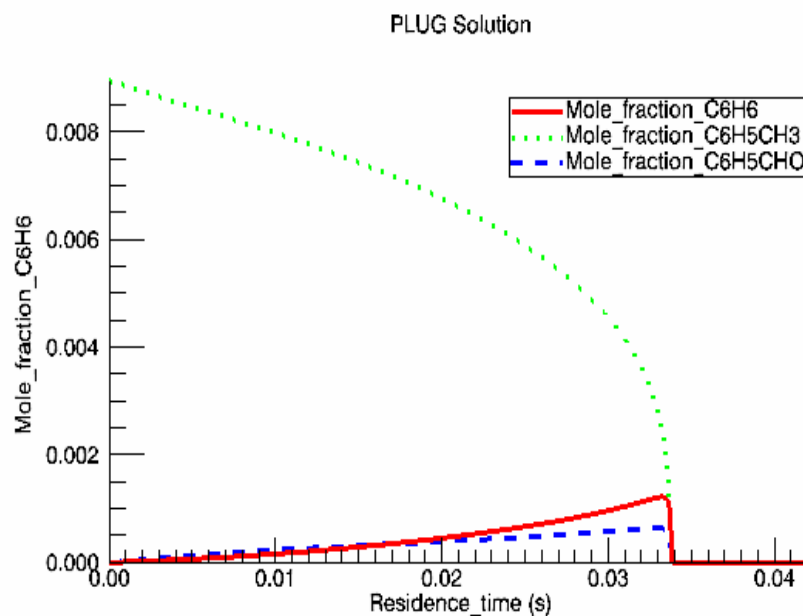
Gambar 7.48 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk H, O, OH, HO₂. Kondisi penelitian : T = 1190 K dan $\phi = 1,4$ (0,962% C₆H₅CH₃, 6,184% O₂ dan 92,85% Ar)



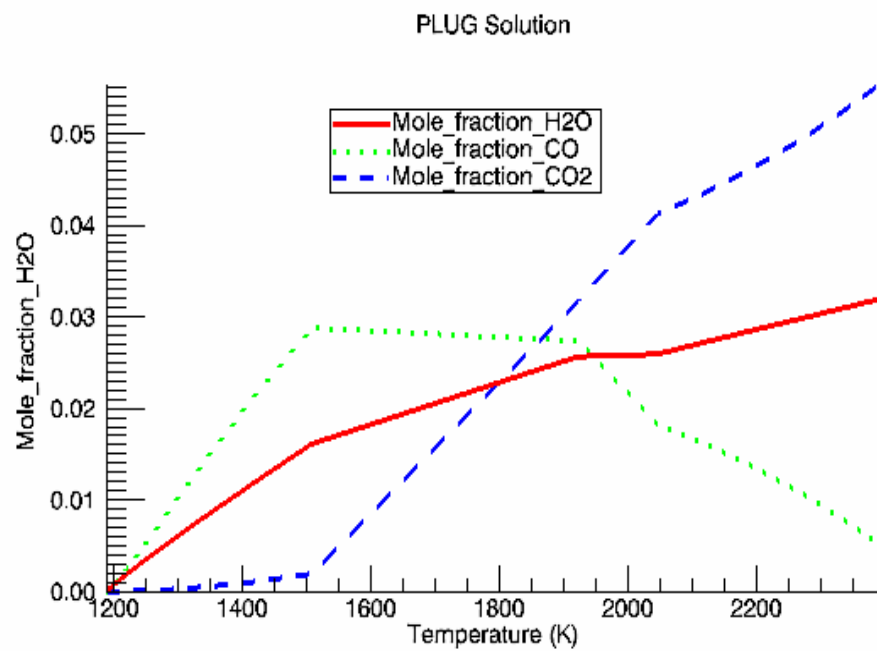
Gambar 7.49 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk H, O, OH, HO₂. Kondisi penelitian : T = 1190 K dan $\phi = 1,4$ (0,962% C₆H₅CH₃, 6,184% O₂ dan 92,85% Ar)



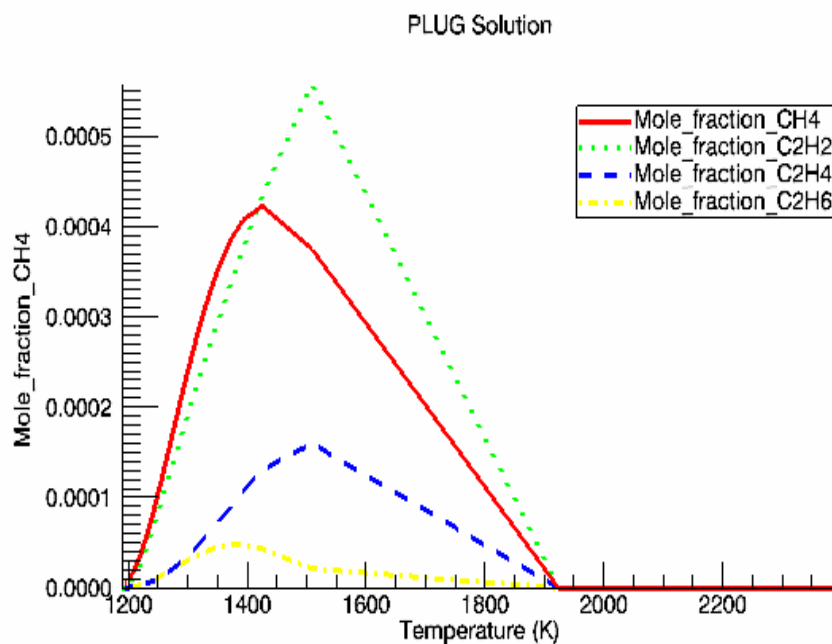
Gambar 7.50 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk CH₄, C₂H₂, C₂H₄ dan C₂H₆. Kondisi penelitian : T = 1190 K dan $\phi = 1,4$ (0,962% C₆H₅CH₃, 6,184% O₂ dan 92,85% Ar)



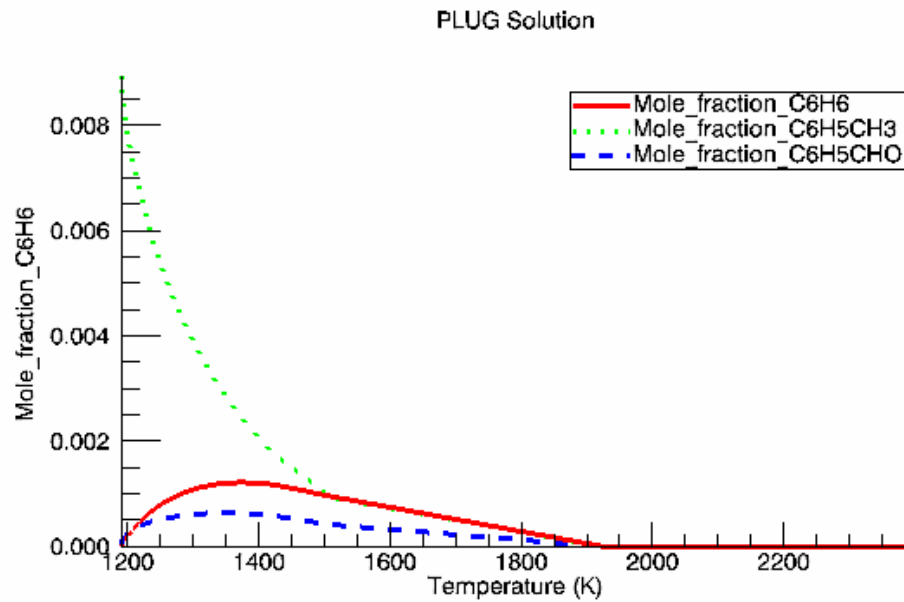
Gambar 7.51 Perbandingan profil konsentrasi pada spesi *flow reactor* pada kondisi 1 atm untuk C₆H₆, C₆H₅CH dan C₆H₅CHO. Kondisi penelitian oleh Brezinsky dan Dryer: T = 1190 K dan $\phi = 1,4$ (0,962% C₆H₅CH₃, 6,184% O₂ dan 92,85% Ar)



Gambar 7.52 Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada *flow reactor* pada kondisi 2 atm . Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1190$ K dan $\phi = 1,43$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 6,18% O_2 dan 92,85% Ar).



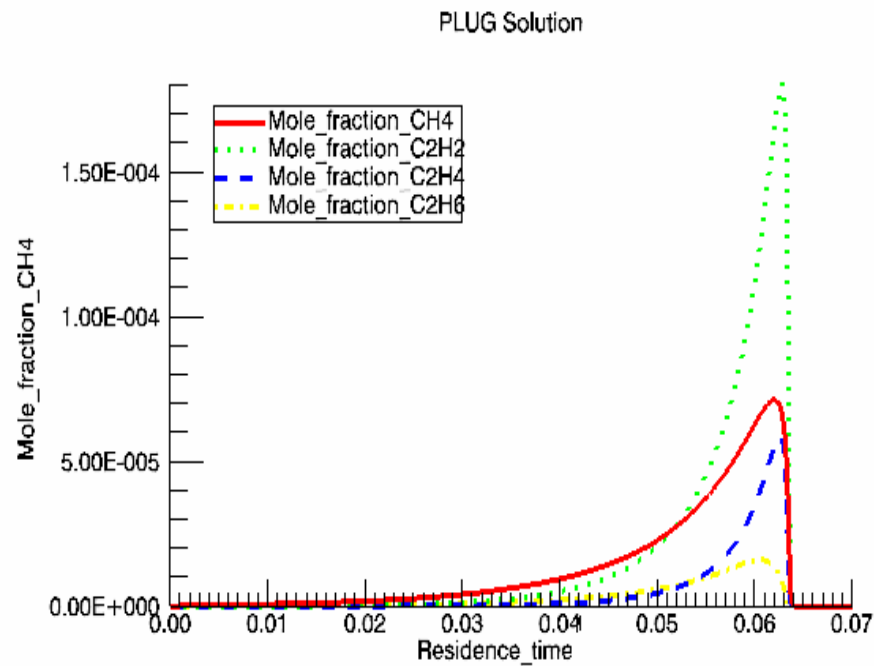
Gambar 7.53 Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada *flow reactor* pada kondisi 2 atm. Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : $T = 1190$ K dan $\phi = 1,43$ (0,962% $C_6H_5CH_3$, 6,18% O_2 dan 92,85% Ar).



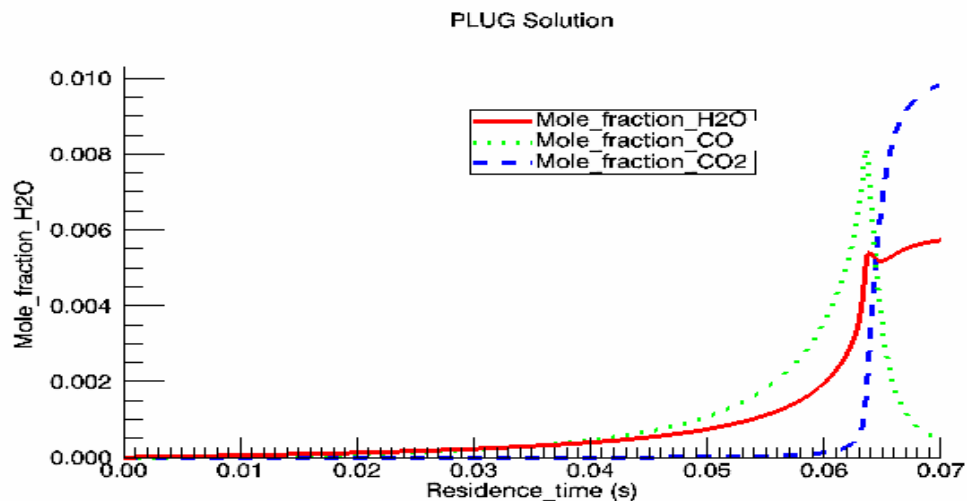
Gambar 7.54 Perbandingan profil temperatur reaksi spesi pada *flow reactor* pada kondisi 2 atm . Kondisi penelitian dari Brezinsky dan Dryer : T = 1190 K dan $\phi = 1,43$ (0,962% C₆H₅CH₃, 6,18% O₂ dan 92,85% Ar)

Dengan mengacu pada data validasi *plug flow reactor* seperti yang ditunjukkan pada Gambar 5.7 sampai Gambar 5.20 beberapa hal mengenai profile konsentrasi spesi yang dihasilkan bisa dijelaskan menurut kinetika reaksi terkait. Konsentrasi spesi toluena, karbon monoksida dan metana seperti ditunjukkan Gambar 5.7, 5.9 dan 5.17 yang merupakan fungsi waktu tinggal dalam reaktor (*residence time*) baik untuk *lean fuel* maupun *rich fuel* menunjukkan tingkat keakuratan yang cukup baik terhadap hasil percobaan terkait. Dalam hal spesi benzaldehida, khususnya untuk kasus *fuel rich* menunjukkan adanya penyimpangan yang cukup signifikan pada saat awal bereaksi. Hasil prediksi ini secara umum menunjukkan keakuratan yang cukup baik terhadap spesi hidrokarbon ringan seperti metana, etana, etilen dan asetilen.

Spesi –spesi yang muncul sebagai hasil pembakaran pada umumnya akan terkonsumsi habis oleh reaksi –reaksi pembakaran yang terjadi selama masih adanya oksigen dan tetap berada dalam reaktor dan akan menghasilkan produk akhir reaksi berupa CO₂ dan H₂O sebagai produk akhir suatu reaksi pembakaran sempurna. Salah satu profil reaksi pembakaran sempurna bisa dilihat pada Gambar 7.55 dan Gambar 7.56



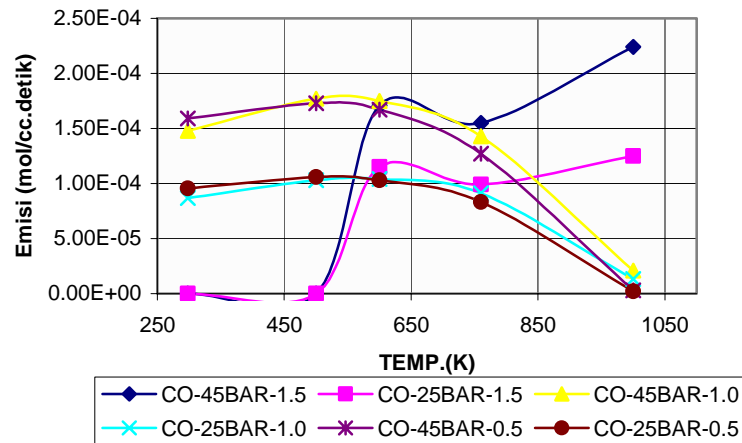
Gambar 7.55 Profil konsentrasi spesi hidrokarbon ringan untuk reaksi pembakaran sempurna.



Gambar 7.56 Profil konsentrasi spesi H₂O, CO dan CO₂ O dan CO₂ untuk pembakaran sempurna.

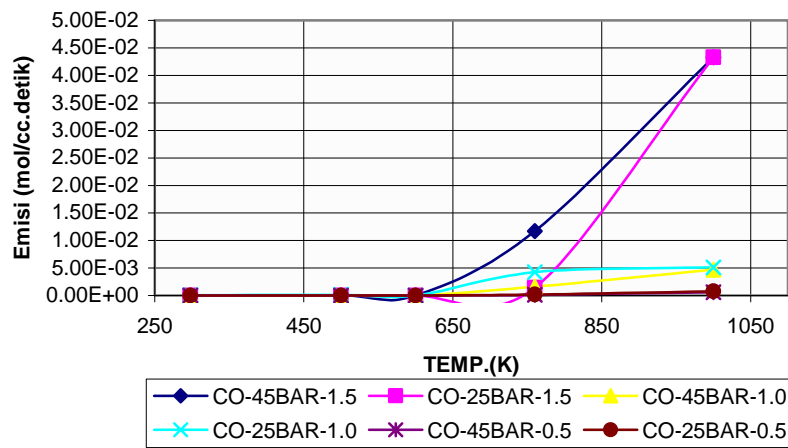
Kinerja suatu reaksi pembakaran umumnya diukur dari seberapa besar jumlah bahan bakar yang terkonversi secara sempurna menjadi CO₂ dan H₂O dimana akan dihasilkan panas reaksi yang maksimum. Namun dalam

prakteknya tingkat pembakaran maksimum secara teknis tidak bisa diaplikasikan secara maksimal terkait dengan dimensi fisik reaktor, batasan ketahanan material, dan rekomendasi yang diijinkan untuk emisi, dimana sebagai konsekwensinya akan produk CO. Gambar 7.57-7.58 menunjukkan perbandingan emisi yang dihasilkan pada berbagai kondisi operasi yang diterapkan.



Gambar 7.57 Perbandingan profil emisi CO pada PSR reactor pada kondisi 25 dan 45 atm dan $\phi = 0,5, 1,0$ dan 1.5.

Dari Gambar 7.58 terlihat bahwa pada kondisi *fuel rich* ($\phi > 1.0$) dimana kandungan bahan bakar secara molal melebihi jumlah oksigen yang disuplai sehingga pembakaran sempurna tidak dapat berlangsung yang dikarenakan reaktan oksigen terkonsumsi habis lebih dahulu, sedangkan sisa toluena akan bereaksi dengan radikal lainnya. Sedangkan kondisi stoikimetri dan *lean fuel* pada temperatur tertentu akan menunjukkan profile emisi CO yang menurun yang tentunya akan mengarah pada reaksi pembakaran yang lebih sempurna. Dalam hal simulasi terhadap jenis reaktor *plug flow* dengan kondisi operasi yang mana, emisi yang dihasilkan khususnya untuk CO menunjukkan bahwa laju produksinya pada rentang temperatur yang sama lambat, tetapi setelah melewati temperatur 600 K, menunjukkan konversi yang lebih tinggi dibandingkan reaktor PSR. Dalam jumlah emisi CO, reaktor *Plug Flow* menunjukkan jumlah yang lebih tinggi.



Gambar 7.58 Perbandingan profil emisi CO pada *Plug Flow reactor* pada kondisi 25 dan 45 bar, $\phi = 0,5, 1,0$ dan 1.5.

BAB VIII

KESIMPULAN

Kesimpulan yang diperoleh dari penelitian yang telah dilakukan adalah :

1. Pengaruh beban konsentrasi bahan bakar dan oksigen sebagaimana ditunjukkan oleh angka rasio ekivalensi (ϕ) menunjukkan bahwa kondisi kondisi ϕ yang lebih rendah pada tekanan dan temperatur tetap akan bereaksi lengkap lebih cepat sebagaimana dengan ditunjukkan oleh waktu tunda ignisi yang lebih pendek. Hal inimenunjukkan bahwa oksigen akan lebih mudah bereaksi pada tekanan parsial bahan bakar yang lebih rendah.
2. Hasil simulasi untuk profil konsentrasi spesi pada *perfectly stirred reactor* (PSR) pada tekanan yang lebih tinggi dan kondisi yang lain dibuat sama menunjukkan reaksi akan berjalan lebih cepat pada kondisi tekanan yang lebih tinggi.
3. Hasil validasi konsentrasi spesi di *plug flow reactor* menunjukkan kesesuaian yang cukup baik antara hasil perhitungan dengan data percobaan. Kondisi penelitian dilaksanakan pada tekanan 1 atm, temperatur 1190 dan 1200 K, dan rasio ekivalensi (ϕ) 0,63 dan 1,40. Konsentrasi spesi ditunjukkan untuk $C_6H_5CH_3$, CO, CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 dan C_2H_6 .
4. Reaksi-reaksi elementer yang tercantum pada Tabel 5.1 dan 5.2 adalah reaksi-reaksi yang mengendalikan reaksi keseluruhan, dan yang paling sensitif adalah reaksi $H_2 + O_2 \rightleftharpoons O + OH$ dimana dengan merubah sedikit parameter laju reaksinya akan berdampak signifikan terhadap perubahan reaksi pembakaran secara keseluruhan. Hal ini berlaku untuk berbagai jenis reaktor seperti yang diaplikasikan pada penelitian ini yaitu *shock tube*, *perfectly stirred reactor* (PSR) maupun *plug flow reactor* (PFR).
5. Tingkatan sensitifitas reaksi sangat bergantung pada temperatur, tekanan dan rasio dari bahan bakar terhadap oksigen. Kondisi tekanan dan temperatur yang lebih tinggi akan berkontribusi terhadap sensitifitas yang



- lebih tinggi. Sedangkan dengan rasio ekivalensi (ϕ) akan menunjukkan perilaku sebaliknya.
6. Konsumsi toluena pada *perfectly stirred reactor (PSR)* pada tekanan 45 atm, rasio ekivalensi (ϕ)=1,0 dan temperatur 1045 K terjadi terutama melalui reaksi $C_6H_5CH_3+OH\rightleftharpoons C_6H_5CH_2+H_2O$ yang mencapai 48,9%.
 7. Konsumsi toluena pada *perfectly stirred reactor (PSR)* pada tekanan 25 atm, rasio ekivalensi (ϕ)=1,0 dan temperatur 1045 K terjadi juga terutama melalui reaksi $C_6H_5CH_3+OH\rightleftharpoons C_6H_5CH_2+H_2O$ dengan angka yang lebih tinggi 56,6%.
 8. Konsumsi toluena di *perfectly stirred reactor (PSR)* pada tekanan 45 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 0,75 dan temperatur 1045 K juga terjadi pada reaksi $C_6H_5CH_3+OH\rightleftharpoons C_6H_5CH_2+H_2O$ dengan pencapaian sebesar 44,7%.
 9. Konsumsi toluena di *jet stirred reactor* pada tekanan 45 atm, rasio ekivalensi (ϕ) = 0,5 dan temperatur 1045 K juga terjadi pada reaksi $C_6H_5CH_3+OH\rightleftharpoons C_6H_5CH_2+H_2O$ dengan pencapaian sebesar 45,7%.
 10. Pada simulasi, *ignition delay time* di *shock tube* yang paling cepat terdapat pada kondisi tekanan tinggi dan rasio campuran *fuel lean*.
 11. Pada simulasi pada *perfectly stirred reactor (PSR)*, konsentrasi produk paling rendah terdapat pada kondisi rasio ekivalensi (ϕ) rendah , tekanan rendah dan temperatur rendah.
 12. Pada simulasi di *plug flow reactor (PFR)*, konsentrasi produk paling rendah terdapat pada kondisi rasio ekivalensi rendah, tekanan rendah dan temperatur rendah.
 13. Reaktor *Plug Flow (PFR)* dengan kondisi operasi yang sama akan menghasilkan konversi reaksi yang lebih tinggi dibandingkan dengan *perfectly stirred reactor (PSR)*.
 14. Dalam hal produk pembakaran pada tekanan 25 atm dan 45 atm, emisi karbonmonoksida (CO) untuk bahan bakar *fuel rich* akan menunjukkan profil konsentrasi yang meningkat selama berlangsungnya proses pembakaran. Sedangkan pada kondisi stoikiometrik maupun *fuel lean*, emisi karbonmonoksida (CO) menunjukkan penurunan konsentrasi pada temperatur diatas 650 K.

DAFTAR ACUAN

- [1] Najt, P. M. and Foster, D. E., "Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion" SAE paper 830264, 2008.
- [2] Emdee, J.J., Brezinsky, K., and Glassman, I., *J. Phys. Chem.* 96: 2151-2161 (1992).
- [3] Lindstedt, R.P., Maurice L.Q., "Detailed Kinetic Modeling of Toluene Combustion", Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, London SW, June 1996, hal 134-139.
- [4] Burcat, A., Farmer, R.C., Espinoza, R.L., and Matula, R.A., *Combust. Flame* 36: 313-316 (1979).
- [5] Vasudevan, D.F., Davidson, R.K., Hanson, R.K., "Shock Tube Measurements of Toluene Ignition Times and OH Concentration Time Histories", *Proceedings of the Combustion Institute* 30, 1155 (2005).
- [6] Wing Tsang, Workshop on Combustion Simulation Databases for Real Transportation Fuels, Sept 4-5, 2003, National Institute of Standard and Technology (2003).
- [7] Bhaskaran K.A, P. Roth. "The Shock Tube as Wave Reactor for Kinetic Studies and Material Systems". *Program Energy Combustion Science* 28 (2002), hal.151 .
- [8] Muharam Y. "Detailed Kinetic Modelling of the Oxidation and Combustion of Large Hydrocarbons Using an Automatic Generation of Mechanisms". Disertasi, University of Heidelberg, Heidelberg, 2005, hal.1-27.
- [9] Warnatz J, U. Maas, R.W. Dibble. *Combustion, Physical and Chemical Fundamentals, Modelling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation 3rd ed.* (Heidelberg: Springer, 2001).
- [10] Heghes C.I. "C1-C4 Hydrocarbon Oxidation Mechanism". Disertasi, University of Heidelberg, Heidelberg, 2006, hal.35-38, 86-99.
- [11] Bhaskaran K.A, P. Roth. "The Shock Tube as Wave Reactor for Kinetic Studies and Material Systems". *Program Energy Combustion Science* 28 (2002), hal.151.
- [12] Dongreen, J. W., "Chemical Engineering Handbook", 7th edition, Mc Graw Hill, 2001.

- [13] MJ Pilling (Ed), "Low Temperature Combustion and Ignition", Elsevier, Amsterdam, 1997, hal. 661.
- [14] Curran H.J, *et al.* Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion (1992). The Combustion Institute, hal. 769.
- [15] Norton T.S, F.L. Dryer. "An Experimental and Modeling Study Of Toluene Oxidation Kinetics in an Atmospheric Pressure Flow Reactor". *International Journal Chemical Kinetic* 24 (1992), hal.319–344.
- [16] Malte P.C, *et al.* "Behavior of OH and NO_x in a Mixing Influenced Jet Stirred Reactor". AIAA 18th Aerospace Sciences Meeting (1980), vol.5.
- [17] Zoran M. Djuriscic, Ameya V. Joshi, and Hai Wang, "Detailed Kinetic Modeling of Benzene and Toluene", Department of Mechanical Engineering, University of Delaware, Newark, 2005, hal. 4.
- [18] Bhaskaran K.A, P. Roth. "The Shock Tube as Wave Reactor for Kinetic Studies and Material Systems". *Program Energy Combustion Science* 28 (2002), hal.151.
- [19] Stull D.R, H. Prophet. "JANAF Thermochemical Tables". Department of Commerce, Washington DC Technical Report, 1971.
- [20] W.J. Pitz, J. W. Bozelli. "Chemical Kinetic Study of Toluene Oxidation Under Premixed and Non-Premixed Condition", 30th International Symposium on Combustion, Chicago, IL, United States, July 25, 2004.
- [21] Zoran M. Djuriscic, Ameya V. Joshi, and Hai Wang, "Detailed Kinetic Modeling of Benzene and Toluene", Department of Mechanical Engineering, University of Delaware, Newark, 2005, hal. 4.
- [22] Gaurav Mittal and Chih-Jen Sung, "Autoignition of Benzene and Toluene at Elevated Pressure in a Rapid Compression Machine", Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Case Western Reserve University, Cleveland OH, July 2006, hal. 355-368.
- [23] Andrae, J.C.G, Cracknell, R.F., "Autoignition of Toluene Reference Fuels at High Pressure Modeled with Detailed Chemical Kinetics", Department of Chemical Engineering and Technology, Royal Institute of Technology, Sweden, June, 2006, hal.4-7.

DAFTAR PUSTAKA

Lindstedt, R.P., Maurice L.Q., "Detailed Kinetic Modeling of Toluene Combustion", Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, London SW, June 1996, hal 134-139.

Burcat, A., Farmer, R.C., Espinoza, R.L., and Matula, R.A., *Combust. Flame* 36: 313-316 (1979).

Charles K. Westbrook, Meeting the Challenge of Reducing Global GHG Emissions Through Energy Research, Lawrence Livermore National Laboratory, June 13-16, 2005.

Dongreen, J. W., "Chemical Engineering Handbook", 7th edition, Mc Graw Hill, 2001.

Warnatz J, U. Maas, R.W. Dibble. *Combustion, Physical and Chemical Fundamentals, Modelling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation 3rd*

Norton T.S, F.L. Dryer. "An Experimental and Modeling Study Of Toluene Oxidation Kinetics in an Atmospheric Pressure Flow Reactor". *International Journal Chemical Kinetic* 24 (1992), hal.319–344.

MJ Pilling (Ed), "Low Temperature Combustion and Ignition", Elsevier,

W.J. Pitz, J. W. Bozelli. "Chemical Kinetic Study of Toluene Oxidation Under Premixed and Non-Premixed Condition", 30th International Symposium on Combustion, Chicago, IL, United States, July 25, 2004.

Zoran M. Djuricic, Ameya V. Joshi, and Hai Wang, "Detailed Kinetic Modeling of Benzene and Toluene", Department of Mechanical Engineering, University of Delaware, Newark, 2005, hal. 4.

Gaurav Mittal and Chih-Jen Sung, "Autoignition of Benzene and Toluene at Elevated Pressure in a Rapid Compression Machine", Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Case Western Reserve University, Cleveland OH, July 2006, hal. 355-368.

Andrae, J.C.G, Cracknell, R.F., "Autoignition of Toluene Reference Fuels at High Pressure Modeled with Detailed Chemical Kinetics", Department of Chemical Engineering and Technology, Royal Institute of Technology, Sweden, June, 2006, hal.4-7.

LAMPIRAN

1. Data Perbandingan Waktu Ignisi Untuk Eksperimen dan Simulasi

No.	Tekanan (bar)	Temperature (K)	ϕ	Ignition Delay (milidetik)		Rel. Error (%)
				Eksperimen	Simulasi	
1	25	980	0.50	60	66.0	10.0
2	25	1000	0.50	32	35.0	9.4
3	25	1052	0.50	8	7.7	3.8
4	25	1075	0.50	4	4.1	2.5
5	25	980	1.00	100	57.7	42.3
6	25	1041	1.00	30	31.4	4.7
7	25	1075	1.00	10	12.3	23.0
8	45	980	0.50	20	20.4	2.0
9	45	1000	0.50	9	10.9	21.1
10	45	1052	0.50	2.5	2.4	5.2
11	45	1075	0.50	1.5	1.3	15.3
12	45	980	0.75	30	39.0	30.0
13	45	1000	0.75	20	20.7	3.5
14	45	1052	0.75	4	4.5	12.5
15	45	980	1.00	60	61.1	1.8
16	45	1000	1.00	30	32.6	8.7
17	45	1052	1.00	6	7.1	18.3
18	45	1075	1.00	4	3.8	5.0
Rata-rata Error (%)						12.20

2. Koefisien Laju Mekanisme Reaksi Oksidasi dan Pembakaran Toluena

REACTIONS CONSIDERED		$(k = A T^{**b} \exp(-E/RT))$		
		A	b	E
1.	H+O2=O+OH	8.30E+13	0.0	14413.0
2.	O+H2=H+OH	5.00E+04	2.7	6290.0
3.	OH+H2=H+H2O	2.16E+08	1.5	3430.0
4.	OH+OH=O+H2O	3.57E+04	2.4	-2110.0
5.	H+H+M=H2+M	1.00E+18	-1.0	0.0
	AR	Enhanced by	6.300E-01	
	CO2	Enhanced by	0.000E+00	
	H2O	Enhanced by	0.000E+00	
	H2	Enhanced by	0.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00	
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
6.	H+H+H2=H2+H2	9.00E+16	-0.6	0.0
7.	H+H+H2O=H2+H2O	6.00E+19	-1.2	0.0
8.	H+H+CO2=H2+CO2	5.50E+20	-2.0	0.0
9.	H+OH+M=H2O+M	2.20E+22	-2.0	0.0
	AR	Enhanced by	3.800E-01	
	H2O	Enhanced by	3.650E+00	
	H2	Enhanced by	7.300E-01	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00	
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
10.	O+H+M=OH+M	5.00E+17	-1.0	0.0

	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
11.	O+O+M=O2+M			1.20E+17	-1.0	0.0
	AR	Enhanced by	8.300E-01			
	CO	Enhanced by	1.800E+00			
	CO2	Enhanced by	3.600E+00			
	H2O	Enhanced by	1.540E+01			
	H2	Enhanced by	2.400E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
12.	H+O2+M=H2O+M			2.80E+18	-0.9	0.0
	AR	Enhanced by	0.000E+00			
	N2	Enhanced by	0.000E+00			
	O2	Enhanced by	0.000E+00			
	CO	Enhanced by	8.000E-01			
	CO2	Enhanced by	1.500E+00			
	H2O	Enhanced by	0.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	1.500E+00			
13.	H+O2+O2=H2O+O2			3.00E+20	-1.7	0.0
14.	H+O2+H2O=H2O+H2O			1.65E+19	-0.8	0.0
15.	H+O2+N2=H2O+N2			2.60E+19	-1.2	0.0
16.	H+O2+AR=H2O+AR			7.00E+17	-0.8	0.0
17.	OH+OH(+M)=H2O2(+M)			7.40E+13	-0.4	0.0
	Low pressure limit:	0.23000E+19	-0.90000E+00	-0.17000E+04		
	TROE centering:	0.73460E+00	0.94000E+02	0.17560E+04	0.51820E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
18.	H2O+H=O+H2O			3.97E+12	0.0	671.0
19.	H2O+H=O2+H2			1.66E+13	0.0	820.0
20.	H2O+H=OH+OH			7.08E+13	0.0	300.0
21.	H2O+O=OH+O2			2.00E+13	0.0	0.0
22.	H2O+OH=O2+H2O			4.64E+13	0.0	-500.0
23.	H2O+H2O=O2+H2O2			1.30E+11	0.0	-1630.0
	Declared duplicate reaction...					
24.	H2O+H2O=O2+H2O2			4.20E+14	0.0	12000.0
	Declared duplicate reaction...					
25.	H2O2+H=H2O+H2			1.21E+07	2.0	5200.0
26.	H2O2+H=OH+H2O			1.00E+13	0.0	3600.0
27.	H2O2+O=OH+H2O			9.63E+06	2.0	4000.0
28.	H2O2+OH=H2O+H2O			1.75E+12	0.0	320.0
	Declared duplicate reaction...					
29.	H2O2+OH=H2O+H2O			5.80E+14	0.0	9560.0
	Declared duplicate reaction...					
30.	CO+O+M=CO2+M			6.02E+14	0.0	3000.0
	AR	Enhanced by	5.000E-01			
	O2	Enhanced by	6.000E+00			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	3.500E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
31.	CO+OH=CO2+H			4.76E+07	1.2	70.0
32.	CO+H2(+M)=CH2O(+M)			4.30E+07	1.5	79600.0
	Low pressure limit:	0.50700E+28	-0.34200E+01	0.84350E+05		
	TROE centering:	0.93200E+00	0.19700E+03	0.15400E+04	0.10300E+05	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			

	C2H4	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00				
33.	CO+O2=CO2+O			2.50E+12	0.0	47800.0	
34.	CO+H2=CO2+OH			1.50E+14	0.0	23600.0	
35.	C+OH=CO+H			5.00E+13	0.0	0.0	
36.	C+O2=CO+O			5.80E+13	0.0	576.0	
37.	CH+H=C+H2			1.10E+14	0.0	0.0	
38.	CH+O=CO+H			5.70E+13	0.0	0.0	
39.	CH+OH=HCO+H			3.00E+13	0.0	0.0	
40.	CH+H2=CH2+H			1.10E+08	1.8	1670.0	
41.	CH+H2O=CH2O+H			5.71E+12	0.0	-755.0	
42.	CH+O2=HCO+O			3.30E+13	0.0	0.0	
43.	CH+CO(+M)=HCCO(+M)			5.00E+13	0.0	0.0	
	Low pressure limit:		0.26900E+29	-0.37400E+01	0.19360E+04		
	TROE centering:		0.57570E+00	0.23700E+03	0.16520E+04	0.50690E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01				
	CO	Enhanced by	1.500E+00				
	CO2	Enhanced by	2.000E+00				
	H2O	Enhanced by	6.000E+00				
	H2	Enhanced by	2.000E+00				
	CH4	Enhanced by	2.000E+00				
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00				
44.	CH+CO2=HCO+CO			3.40E+12	0.0	690.0	
45.	HCO+H(+M)=CH2O(+M)			1.09E+12	0.5	-260.0	
	Low pressure limit:		0.13500E+25	-0.25700E+01	0.14250E+04		
	TROE centering:		0.78240E+00	0.27100E+03	0.27550E+04	0.65700E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01				
	CO	Enhanced by	1.500E+00				
	CO2	Enhanced by	2.000E+00				
	H2O	Enhanced by	6.000E+00				
	H2	Enhanced by	2.000E+00				
	CH4	Enhanced by	2.000E+00				
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00				
46.	HCO+H=CO+H2			7.34E+13	0.0	0.0	
47.	HCO+O=CO+OH			3.00E+13	0.0	0.0	
48.	HCO+O=CO2+H			3.00E+13	0.0	0.0	
49.	HCO+OH=CO+H2O			5.00E+13	0.0	0.0	
50.	HCO+M=CO+H+M			1.87E+17	-1.0	17000.0	
	CO	Enhanced by	1.500E+00				
	CO2	Enhanced by	2.000E+00				
	H2O	Enhanced by	6.000E+00				
	H2	Enhanced by	2.000E+00				
	CH4	Enhanced by	2.000E+00				
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00				
51.	HCO+O2=CO+HO2			7.60E+12	0.0	400.0	
52.	CH2+H(+M)=CH3(+M)			2.50E+16	-0.8	0.0	
	Low pressure limit:		0.32000E+28	-0.31400E+01	0.12300E+04		
	TROE centering:		0.68000E+00	0.78000E+02	0.19950E+04	0.55900E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01				
	CO	Enhanced by	1.500E+00				
	CO2	Enhanced by	2.000E+00				
	H2O	Enhanced by	6.000E+00				
	H2	Enhanced by	2.000E+00				
	CH4	Enhanced by	2.000E+00				
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00				
53.	CH2+H2=H+CH3			5.00E+05	2.0	7230.0	
54.	CH2+O=HCO+H			8.00E+13	0.0	0.0	
55.	CH2+O2=HCO+OH			1.06E+13	0.0	1500.0	
56.	CH2+O2=CO2+H+H			2.64E+12	0.0	1500.0	
57.	CH2+OH=CH2O+H			2.00E+13	0.0	0.0	
58.	CH2+OH=CH+H2O			1.13E+07	2.0	3000.0	
59.	CH2+HO2=CH2O+OH			2.00E+13	0.0	0.0	
60.	CH2+C=C2H+H			5.00E+13	0.0	0.0	
61.	CH2+CO(+M)=CH2CO(+M)			8.10E+11	0.5	4510.0	
	Low pressure limit:		0.26900E+34	-0.51100E+01	0.70950E+04		
	TROE centering:		0.59070E+00	0.27500E+03	0.12260E+04	0.51850E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01				
	CO	Enhanced by	1.500E+00				
	CO2	Enhanced by	2.000E+00				
	H2O	Enhanced by	6.000E+00				
	H2	Enhanced by	2.000E+00				
	CH4	Enhanced by	2.000E+00				
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00				
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00				

62.	CH2+CH=C2H2+H		4.00E+13	0.0	0.0
63.	CH2+CH2=C2H2+H2		3.20E+13	0.0	0.0
64.	CH2*+N2=CH2+N2		1.50E+13	0.0	600.0
65.	CH2*+AR=CH2+AR		9.00E+12	0.0	600.0
66.	CH2*+H=CH+H2		3.00E+13	0.0	0.0
67.	CH2*+O=CO+H2		1.50E+13	0.0	0.0
68.	CH2*+O=HCO+H		1.50E+13	0.0	0.0
69.	CH2*+OH=CH2O+H		3.00E+13	0.0	0.0
70.	CH2*+H2=CH3+H		7.00E+13	0.0	0.0
71.	CH2*+O2=H+OH+CO		2.80E+13	0.0	0.0
72.	CH2*+O2=CO+H2O		1.20E+13	0.0	0.0
73.	CH2*+H2O(+M)=CH3OH(+M)		2.00E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.27000E+39	-0.63000E+01	0.31000E+04	
	TROE centering:	0.15070E+00	0.13400E+03	0.23830E+04	0.72650E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
74.	CH2*+H2O=CH2+H2O		3.00E+13	0.0	0.0
75.	CH2*+CO=CH2+CO		9.00E+12	0.0	0.0
76.	CH2*+CO2=CH2+CO2		7.00E+12	0.0	0.0
77.	CH2*+CO2=CH2O+CO		1.40E+13	0.0	0.0
78.	CH2O+H(+M)=CH2OH(+M)		5.40E+11	0.5	3600.0
	Low pressure limit:	0.12700E+33	-0.48200E+01	0.65300E+04	
	TROE centering:	0.71870E+00	0.10300E+03	0.12910E+04	0.41600E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
79.	CH2O+H(+M)=CH3O(+M)		5.40E+11	0.5	2600.0
	Low pressure limit:	0.22000E+31	-0.48000E+01	0.55600E+04	
	TROE centering:	0.75800E+00	0.94000E+02	0.15550E+04	0.42000E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
80.	CH2O+H=HCO+H2		2.30E+10	1.1	3275.0
81.	CH2O+O=HCO+OH		3.90E+13	0.0	3540.0
82.	CH2O+OH=HCO+H2O		3.43E+09	1.2	-447.0
83.	CH2O+O2=HCO+HO2		1.00E+14	0.0	40000.0
84.	CH2O+HO2=HCO+H2O2		1.00E+12	0.0	8000.0
85.	CH2O+CH=CH2CO+H		9.46E+13	0.0	-515.0
86.	CH3+H(+M)=CH4(+M)		1.27E+16	-0.6	383.0
	Low pressure limit:	0.24770E+34	-0.47600E+01	0.24400E+04	
	TROE centering:	0.78300E+00	0.74000E+02	0.29410E+04	0.69640E+04
	AR	Enhanced by	7.000E-01		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
87.	CH3+O=CH2O+H		8.43E+13	0.0	0.0
88.	CH3+OH(+M)=CH3OH(+M)		6.30E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.27000E+39	-0.63000E+01	0.31000E+04	
	TROE centering:	0.21050E+00	0.83500E+02	0.53980E+04	0.83700E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
89.	CH3+OH=CH2+H2O		5.60E+07	1.6	5420.0
90.	CH3+OH=CH2*+H2O		2.50E+13	0.0	0.0
91.	CH3+O2=O+CH3O		3.08E+13	0.0	28800.0
92.	CH3+O2=OH+CH2O		3.60E+10	0.0	8940.0
93.	CH3+HO2=CH4+O2		1.00E+12	0.0	0.0

94.	CH3+H2O2=CH3O+OH		1.34E+13	0.0	0.0
95.	CH3+H2O2=CH4+H2O		2.45E+04	2.5	5180.0
96.	CH3+C=C2H2+H		5.00E+13	0.0	0.0
97.	CH3+CH=C2H3+H		3.00E+13	0.0	0.0
98.	CH3+HCO=CH4+CO		8.48E+12	0.0	0.0
99.	CH3+HCO(+M)=CH3CHO(+M)		1.80E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.22000E+49	-0.95880E+01	0.51000E+04	
	TROE centering:	0.61730E+00	0.13076E+02	0.20780E+04	0.50930E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
100.	CH3+CH2O=CH4+HCO		3.32E+03	2.8	5860.0
101.	CH3+CH2=C2H4+H		4.00E+13	0.0	0.0
102.	CH3+CH2*=C2H4+H		1.20E+13	0.0	-570.0
103.	CH3+CH3(+M)=C2H6(+M)		2.12E+16	-1.0	620.0
	Low pressure limit:	0.17700E+51	-0.96700E+01	0.62200E+04	
	TROE centering:	0.53250E+00	0.15100E+03	0.10380E+04	0.49700E+04
	AR	Enhanced by	7.000E-01		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
104.	CH3+CH3=H+C2H5		4.99E+12	0.1	10600.0
105.	CH3+HCCO=C2H4+CO		5.00E+13	0.0	0.0
106.	CH3+C2H=C3H3+H		2.41E+13	0.0	0.0
107.	CH3O+H(+M)=CH3OH(+M)		5.00E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.86000E+29	-0.40000E+01	0.30250E+04	
	TROE centering:	0.89020E+00	0.14400E+03	0.28380E+04	0.45569E+05
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
108.	CH3O+H=CH2OH+H		3.40E+06	1.6	0.0
109.	CH3O+H=CH2O+H2		2.00E+13	0.0	0.0
110.	CH3O+H=CH3+OH		3.20E+13	0.0	0.0
111.	CH3O+H=CH2*+H2O		1.60E+13	0.0	0.0
112.	CH3O+O=CH2O+OH		1.00E+13	0.0	0.0
113.	CH3O+OH=CH2O+H2O		5.00E+12	0.0	0.0
114.	CH3O+O2=CH2O+H2O		4.28E-13	7.6	-3530.0
115.	CH2OH+H(+M)=CH3OH(+M)		1.80E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.30000E+32	-0.48000E+01	0.33000E+04	
	TROE centering:	0.76790E+00	0.33800E+03	0.18120E+04	0.50810E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
116.	CH2OH+H=CH2O+H2		2.00E+13	0.0	0.0
117.	CH2OH+H=CH3+OH		1.20E+13	0.0	0.0
118.	CH2OH+H=CH2*+H2O		6.00E+12	0.0	0.0
119.	CH2OH+O=CH2O+OH		1.00E+13	0.0	0.0
120.	CH2OH+OH=CH2O+H2O		5.00E+12	0.0	0.0
121.	CH2OH+O2=CH2O+H2O		1.80E+13	0.0	900.0
122.	CH4+H=CH3+H2		6.60E+08	1.6	10840.0
123.	CH4+O=CH3+OH		1.02E+09	1.5	8600.0
124.	CH4+OH=CH3+H2O		1.00E+08	1.6	3120.0
125.	CH4+CH=C2H4+H		6.00E+13	0.0	0.0
126.	CH4+CH2=CH3+CH3		2.46E+06	2.0	8270.0
127.	CH4+CH2*=CH3+CH3		1.60E+13	0.0	-570.0
128.	CH3OH+H=CH2OH+H2		1.70E+07	2.1	4870.0
129.	CH3OH+H=CH3O+H2		4.20E+06	2.1	4870.0
130.	CH3OH+O=CH2OH+OH		3.88E+05	2.5	3100.0
131.	CH3OH+O=CH3O+OH		1.30E+05	2.5	5000.0
132.	CH3OH+OH=CH2OH+H2O		1.44E+06	2.0	-840.0
133.	CH3OH+OH=CH3O+H2O		6.30E+06	2.0	1500.0
134.	CH3OH+CH3=CH2OH+CH4		3.00E+07	1.5	9940.0
135.	CH3OH+CH3=CH3O+CH4		1.00E+07	1.5	9940.0

136.	C2H+H(+M)=C2H2(+M)			1.00E+17	-1.0	0.0
	Low pressure limit:	0.37500E+34	-0.48000E+01	0.19000E+04		
	TROE centering:	0.64640E+00	0.13200E+03	0.13150E+04	0.55660E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
137.	C2H+O=CH+CO			5.00E+13	0.0	0.0
138.	C2H+OH=H+HCCO			2.00E+13	0.0	0.0
139.	C2H+O2=HCO+CO			5.00E+13	0.0	1500.0
140.	C2H+H2=H+C2H2			4.90E+05	2.5	560.0
141.	C2O+H=CH+CO			5.00E+13	0.0	0.0
142.	C2O+O=CO+CO			5.00E+13	0.0	0.0
143.	C2O+OH=CO+CO+H			2.00E+13	0.0	0.0
144.	C2O+O2=CO+CO+O			2.00E+13	0.0	0.0
145.	HCCO+H=CH2*+CO			1.00E+14	0.0	0.0
146.	HCCO+O=H+CO+CO			1.00E+14	0.0	0.0
147.	HCCO+O2=OH+2CO			1.60E+12	0.0	854.0
148.	HCCO+CH=C2H2+CO			5.00E+13	0.0	0.0
149.	HCCO+CH2=C2H3+CO			3.00E+13	0.0	0.0
150.	HCCO+HCCO=C2H2+CO+CO			1.00E+13	0.0	0.0
151.	HCCO+OH=C2O+H2O			3.00E+13	0.0	0.0
152.	C2H2(+M)=H2CC(+M)			8.00E+14	-0.5	50750.0
	Low pressure limit:	0.24500E+16	-0.64000E+00	0.49700E+05		
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	2.500E+00			
	C2H4	Enhanced by	2.500E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
153.	C2H3(+M)=C2H2+H(+M)			3.86E+08	1.6	37048.2
	Low pressure limit:	0.25650E+28	-0.34000E+01	0.35799E+05		
	TROE centering:	0.19816E+01	0.53837E+04	0.43000E+01	-0.10000E+00	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
154.	C2H2+O=C2H+OH			4.60E+19	-1.4	28950.0
155.	C2H2+O=HCCO+H			1.63E+07	2.0	1900.0
156.	C2H2+O=CH2+CO			4.08E+06	2.0	1900.0
157.	C2H2+OH=CH2CO+H			2.18E-04	4.5	-1000.0
158.	C2H2+OH=HCCOH+H			5.04E+05	2.3	13500.0
159.	C2H2+OH=C2H+H2O			3.37E+07	2.0	14000.0
160.	C2H2+OH=CH3+CO			4.83E-04	4.0	-2000.0
161.	C2H2+HCO=C2H3+CO			1.00E+07	2.0	6000.0
162.	C2H2+CH=C3H2+H			3.00E+13	0.0	0.0
163.	C2H2+CH2=C3H3+H			1.20E+13	0.0	6620.0
164.	C2H2+CH2*=C3H3+H			2.00E+13	0.0	0.0
165.	C2H2+C2H=C4H2+H			9.60E+13	0.0	0.0
166.	C2H2+C2H(+M)=n-C4H3(+M)			8.30E+10	0.9	-363.0
	Low pressure limit:	0.12400E+32	-0.47180E+01	0.18710E+04		
	TROE centering:	0.10000E+01	0.10000E+03	0.56130E+04	0.13387E+05	
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	2.500E+00			
	C2H4	Enhanced by	2.500E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
167.	C2H2+C2H(+M)=i-C4H3(+M)			8.30E+10	0.9	-363.0
	Low pressure limit:	0.12400E+32	-0.47180E+01	0.18710E+04		
	TROE centering:	0.10000E+01	0.10000E+03	0.56130E+04	0.13387E+05	
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	2.500E+00			
	C2H4	Enhanced by	2.500E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			

168.	C2H2+HCCO=C3H3+CO		1.00E+11	0.0	3000.0
169.	C2H2+CH3=pC3H4+H		2.56E+09	1.1	13644.0
170.	C2H2+CH3=aC3H4+H		5.14E+09	0.9	22153.0
171.	C2H2+CH3+M=CH3CCH2+M		4.00E+24	-3.4	18840.0
172.	C2H2+CH3+M=aC3H5+M		2.20E+55	-11.8	35730.0
173.	C2H2+CH3=CH3CHCH		3.20E+35	-7.8	13300.0
174.	H2CC+H=C2H2+H		1.00E+14	0.0	0.0
175.	H2CC+O=CH2+CO		1.00E+14	0.0	0.0
176.	H2CC+OH=CH2CO+H		2.00E+13	0.0	0.0
177.	H2CC+O2=CO2+CH2		1.00E+13	0.0	0.0
178.	H2CC+C2H2(+M)=C4H4(+M)		3.50E+05	2.1	-2400.0
	Low pressure limit:	0.14000E+61	-0.12599E+02	0.74170E+04	
	TROE centering:	0.98000E+00	0.56000E+02	0.58000E+03	0.41640E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
179.	CH2CO+H(+M)=CH2CHO(+M)		3.30E+14	-0.1	8500.0
	Low pressure limit:	0.38000E+42	-0.76400E+01	0.11900E+05	
	TROE centering:	0.33700E+00	0.17070E+04	0.32000E+04	0.41310E+04
	AR	Enhanced by	7.000E-01		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
180.	CH2CO+H=HCCO+H2		5.00E+13	0.0	8000.0
181.	CH2CO+H=CH3+CO		1.50E+09	1.4	2690.0
182.	CH2CO+O=HCCO+OH		1.00E+13	0.0	8000.0
183.	CH2CO+O=CH2+CO2		1.75E+12	0.0	1350.0
184.	CH2CO+OH=HCCO+H2O		7.50E+12	0.0	2000.0
185.	HCCOH+H=CH2CO+H		1.00E+13	0.0	0.0
186.	C2H3+H(+M)=C2H4(+M)		6.08E+12	0.3	280.0
	Low pressure limit:	0.14000E+31	-0.38600E+01	0.33200E+04	
	TROE centering:	0.78200E+00	0.20750E+03	0.26630E+04	0.60950E+04
	AR	Enhanced by	7.000E-01		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
187.	C2H3+H=C2H2+H2		3.00E+13	0.0	0.0
188.	C2H3+H=H2CC+H2		6.00E+13	0.0	0.0
189.	C2H3+O=CH2CO+H		4.80E+13	0.0	0.0
190.	C2H3+O=CH3+CO		4.80E+13	0.0	0.0
191.	C2H3+OH=C2H2+H2O		3.01E+13	0.0	0.0
192.	C2H3+O2=C2H2+H2O2		1.34E+06	1.6	-383.4
193.	C2H3+O2=CH2CHO+O		3.00E+11	0.3	11.0
194.	C2H3+O2=HCO+CH2O		4.60E+16	-1.4	1010.0
195.	C2H3+H2O2=CH2CHO+OH		1.00E+13	0.0	0.0
196.	C2H3+H2O2=C2H4+H2O		1.21E+10	0.0	-596.0
197.	C2H3+HCO=C2H4+CO		9.03E+13	0.0	0.0
198.	C2H3+CH3=C2H2+CH4		3.92E+11	0.0	0.0
199.	C2H3+CH3(+M)=C3H6(+M)		2.50E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.42700E+59	-0.11940E+02	0.97698E+04	
	TROE centering:	0.17500E+00	0.13406E+04	0.60000E+05	0.10140E+05
	AR	Enhanced by	7.000E-01		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
200.	C2H3+CH3=aC3H5+H		1.50E+24	-2.8	18618.0
201.	C2H3+C2H2=C4H4+H		5.00E+14	-0.7	6700.0
202.	CH2CHO=CH3+CO		7.80E+41	-9.1	46900.0
203.	CH2CHO+H(+M)=CH3CHO(+M)		1.00E+14	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.52000E+40	-0.72970E+01	0.47000E+04	
	TROE centering:	0.55000E+00	0.89000E+04	0.43500E+04	0.72440E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		

	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
204.	CH2CHO+H=CH3CO+H			5.00E+12	0.0	0.0
205.	CH2CHO+H=CH3+HCO			9.00E+13	0.0	0.0
206.	CH2CHO+H=CH2CO+H2			2.00E+13	0.0	4000.0
207.	CH2CHO+O=CH2CO+OH			2.00E+13	0.0	4000.0
208.	CH2CHO+OH=CH2CO+H2O			1.00E+13	0.0	2000.0
209.	CH2CHO+O2=CH2CO+HO2			1.40E+11	0.0	0.0
210.	CH2CHO+O2=CH2O+CO+OH			1.80E+10	0.0	0.0
211.	CH3+CO(+M)=CH3CO(+M)			4.85E+07	1.6	6150.0
	Low pressure limit:	0.78000E+31	-0.53950E+01	0.86000E+04		
	TR0E centering:	0.25800E+00	0.59800E+03	0.21002E+05	0.17730E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
212.	CH3CO+H(+M)=CH3CHO(+M)			9.60E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.38500E+45	-0.85690E+01	0.55000E+04		
	TR0E centering:	0.10000E+01	0.29000E+04	0.29000E+04	0.51320E+04	
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
213.	CH3CO+H=CH3+HCO			8.00E+13	0.0	0.0
214.	CH3CO+O=CH2CO+OH			3.90E+13	0.0	0.0
215.	CH3CO+O=CH3+CO2			1.50E+14	0.0	0.0
216.	CH3CO+OH=CH2CO+H2O			1.20E+13	0.0	0.0
217.	CH3CO+OH=CH3+CO+OH			3.00E+13	0.0	0.0
218.	CH3CO+HO2=CH3+CO2+OH			3.00E+13	0.0	0.0
219.	CH3CO+H2O2=CH3CHO+HO2			1.80E+11	0.0	8226.0
220.	CH3CHO+O2=CH3CO+HO2			3.00E+13	0.0	39100.0
221.	CH3CHO+OH=CH3CO+H2O			2.35E+10	0.7	-1110.0
222.	CH3CHO+H=CH3CO+H2			4.10E+09	1.2	2400.0
223.	CH3CHO+O=CH3CO+OH			5.80E+12	0.0	1800.0
224.	CH3CHO+CH3=CH3CO+CH4			2.00E-06	5.6	2460.0
225.	C2H4(+M)=H2+H2CC(+M)			8.00E+12	0.4	88770.0
	Low pressure limit:	0.70000E+51	-0.93100E+01	0.99860E+05		
	TR0E centering:	0.73450E+00	0.18000E+03	0.10350E+04	0.54170E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
226.	C2H4+H(+M)=C2H5(+M)			1.08E+12	0.5	1820.0
	Low pressure limit:	0.12000E+43	-0.76200E+01	0.69700E+04		
	TR0E centering:	0.97530E+00	0.21000E+03	0.98400E+03	0.43740E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
227.	C2H4+H=C2H3+H2			5.07E+07	1.9	12950.0
228.	C2H4+O=OH+C2H3			1.51E+07	1.9	3740.0
229.	C2H4+O=CH3+HCO			1.92E+07	1.8	220.0
230.	C2H4+O=CH2+CH2O			3.84E+05	1.8	220.0
231.	C2H4+OH=C2H3+H2O			3.60E+06	2.0	2500.0
232.	C2H4+O2=C2H3+HO2			4.22E+13	0.0	60800.0
233.	C2H4+HO2=CH3CHO+OH			2.00E+12	0.0	14000.0
234.	C2H4+HCO=C2H5+CO			1.00E+07	2.0	8000.0
235.	C2H4+CH=aC3H4+H			3.00E+13	0.0	0.0
236.	C2H4+CH=pC3H4+H			3.00E+13	0.0	0.0
237.	C2H4+CH2=aC3H5+H			2.00E+13	0.0	6000.0

238.	C2H4+CH2*=H2CC+CH4		5.00E+13	0.0	0.0
239.	C2H4+CH2*=aC3H5+H		5.00E+13	0.0	0.0
240.	C2H4+CH3=C2H3+CH4		2.27E+05	2.0	9200.0
241.	C2H4+CH3=n-C3H7		3.30E+11	0.0	7700.0
242.	C2H4+C2H=C4H4+H		1.20E+13	0.0	0.0
243.	C2H5+H(+M)=C2H6(+M)		5.21E+17	-1.0	1580.0
	Low pressure limit:	0.19900E+42	-0.70800E+01	0.66850E+04	
	TROE centering:	0.84220E+00	0.12500E+03	0.22190E+04	0.68820E+04
	AR	Enhanced by	7.000E-01		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
244.	C2H5+H=C2H4+H2		2.00E+12	0.0	0.0
245.	C2H5+O=CH3+CH2O		1.60E+13	0.0	0.0
246.	C2H5+O=CH3CHO+H		8.02E+13	0.0	0.0
247.	C2H5+O2=C2H4+HO2		2.00E+10	0.0	0.0
248.	C2H5+HO2=C2H6+O2		3.00E+11	0.0	0.0
249.	C2H5+HO2=C2H4+H2O2		3.00E+11	0.0	0.0
250.	C2H5+HO2=CH3+CH2O+OH		2.40E+13	0.0	0.0
251.	C2H5+H2O2=C2H6+HO2		8.70E+09	0.0	974.0
252.	C2H5+HCO=C2H6+CO		1.20E+14	0.0	0.0
253.	C2H6+H=C2H5+H2		1.15E+08	1.9	7530.0
254.	C2H6+O=C2H5+OH		8.98E+07	1.9	5690.0
255.	C2H6+OH=C2H5+H2O		3.54E+06	2.1	870.0
256.	C2H6+CH2*=C2H5+CH3		4.00E+13	0.0	-550.0
257.	C2H6+CH3=C2H5+CH4		6.14E+06	1.7	10450.0
258.	C3H2+O=C2H2+CO		6.80E+13	0.0	0.0
259.	C3H2+OH=HCO+C2H2		6.80E+13	0.0	0.0
260.	C3H2+O2=HCCO+H+CO		2.00E+12	0.0	1000.0
261.	C3H2+CH=C4H2+H		5.00E+13	0.0	0.0
262.	C3H2+CH2=n-C4H3+H		5.00E+13	0.0	0.0
263.	C3H2+CH3=C4H4+H		5.00E+12	0.0	0.0
264.	C3H2+HCCO=n-C4H3+CO		1.00E+13	0.0	0.0
265.	C3H2+H=C3H3		1.00E+13	0.0	0.0
266.	C3H3+H=pC3H4		1.50E+13	0.0	0.0
267.	C3H3+H=aC3H4		2.50E+12	0.0	0.0
268.	C3H3+H=C3H2+H2		5.00E+13	0.0	1000.0
269.	C3H3+O=CH2O+C2H		2.00E+13	0.0	0.0
270.	C3H3+OH=C3H2+H2O		2.00E+13	0.0	0.0
271.	C3H3+O2=CH2CO+HCO		3.00E+10	0.0	2868.0
272.	C3H3+HO2=OH+CO+C2H3		8.00E+11	0.0	0.0
273.	C3H3+HO2=aC3H4+O2		3.00E+11	0.0	0.0
274.	C3H3+HO2=pC3H4+O2		2.50E+12	0.0	0.0
275.	C3H3+HCO=aC3H4+CO		2.50E+13	0.0	0.0
276.	C3H3+HCO=pC3H4+CO		2.50E+13	0.0	0.0
277.	C3H3+HCCO=C4H4+CO		2.50E+13	0.0	0.0
278.	C3H3+CH=i-C4H3+H		5.00E+13	0.0	0.0
279.	C3H3+CH2=C4H4+H		5.00E+13	0.0	0.0
280.	i-C4H5+H=C3H3+CH3		2.00E+13	0.0	2000.0
281.	C3H3+CH3(+M)=C4H6-1,2(+M)		1.50E+12	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.26000E+58	-0.11940E+02	0.97700E+04	
	TROE centering:	0.17500E+00	0.13406E+04	0.60000E+05	0.97698E+04
	AR	Enhanced by	7.000E-01		
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
282.	C3H3+C3H3=>C6H5+H		5.00E+12	0.0	0.0
283.	C3H3+C3H3=C6H6		2.00E+12	0.0	0.0
284.	pC3H4(+M)=cC3H4(+M)		1.80E+12	0.3	60000.0
	Low pressure limit:	0.18900E+46	-0.88710E+01	0.64200E+05	
	TROE centering:	0.17400E+00	0.10840E+04	0.20000E+05	0.42670E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		
	H2	Enhanced by	2.000E+00		
	CH4	Enhanced by	2.000E+00		
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00		
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00		
285.	cC3H4(+M)=aC3H4(+M)		1.80E+12	0.6	42200.0
	Low pressure limit:	0.40000E+47	-0.91120E+01	0.46900E+05	
	TROE centering:	0.00000E+00	0.23600E+03	0.20000E+04	0.15940E+04
	CO	Enhanced by	1.500E+00		
	CO2	Enhanced by	2.000E+00		
	H2O	Enhanced by	6.000E+00		

	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
286.	pC3H4=aC3H4			3.73E+51	-11.4	83917.2
287.	aC3H4+H=C3H3+H2			1.30E+06	2.0	5500.0
288.	aC3H4+H+M=CH3CCH2+M			7.76E+44	-8.4	11190.0
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
289.	aC3H4+H(+M)=aC3H5(+M)			3.38E+09	1.5	4786.0
	Low pressure limit:	0.75000E+60	-0.12484E+02	0.13678E+05		
	TROE centering:	0.00000E+00	0.65000E+03	0.10000E+04	0.34961E+04	
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
290.	aC3H4+O=C2H4+CO			2.00E+07	1.8	1000.0
291.	aC3H4+OH=C3H3+H2O			5.30E+06	2.0	2000.0
292.	aC3H4+CH3=C3H3+CH4			1.30E+12	0.0	7700.0
293.	aC3H4+C2H=C2H2+C3H3			1.00E+13	0.0	0.0
294.	aC3H4+C6H5=C6H6+C3H3			2.00E+12	0.0	15000.0
295.	pC3H4+H=aC3H4+H			6.27E+17	-0.9	10079.0
296.	pC3H4+H+M=CH3CCH2+M			1.36E+49	-9.6	13690.0
297.	pC3H4+H=CH3CHCH			5.50E+28	-5.7	4300.0
298.	pC3H4+H=aC3H5			2.07E+57	-13.4	29212.9
299.	pC3H4+H=C3H3+H2			1.30E+06	2.0	5500.0
300.	pC3H4+O=HCCO+CH3			7.30E+12	0.0	2250.0
301.	pC3H4+O=C2H4+CO			1.00E+13	0.0	2250.0
302.	pC3H4+O=C3H3+OH			3.45E+04	2.2	4830.0
303.	pC3H4+OH=C3H3+H2O			1.00E+06	2.0	100.0
304.	pC3H4+CH3=C3H3+CH4			1.80E+12	0.0	7700.0
305.	pC3H4+C2H=C2H2+C3H3			1.00E+13	0.0	0.0
306.	pC3H4+C6H5=C3H3+C6H6			2.00E+12	0.0	15000.0
307.	aC3H5+H(+M)=C3H6(+M)			2.00E+14	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.13300E+61	-0.12000E+02	0.59678E+04		
	TROE centering:	0.20000E-01	0.10966E+04	0.10966E+04	0.68595E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
308.	aC3H5+H=aC3H4+H2			1.80E+13	0.0	0.0
309.	aC3H5+H=H2CC+CH4			2.00E+13	0.0	2000.0
310.	aC3H5+O=C2H3CHO+H			6.00E+13	0.0	0.0
311.	aC3H5+OH=C2H3CHO+H+H			4.20E+32	-5.2	30126.0
312.	aC3H5+OH=aC3H4+H2O			6.00E+12	0.0	0.0
313.	aC3H5+O2=aC3H4+HO2			4.99E+15	-1.4	22428.0
314.	aC3H5+O2=CH3CO+CH2O			1.19E+15	-1.0	20128.0
315.	aC3H5+O2=C2H3CHO+OH			1.82E+13	-0.4	22859.0
316.	aC3H5+HO2=C3H6+O2			2.66E+12	0.0	0.0
317.	aC3H5+HO2=OH+C2H3+CH2O			6.60E+12	0.0	0.0
318.	aC3H5+HCO=C3H6+CO			6.00E+13	0.0	0.0
319.	aC3H5+CH3(+M)=C4H8-1(+M)			1.00E+14	-0.3	-262.3
	Low pressure limit:	0.35100E+61	-0.12970E+02	0.60000E+04		
	TROE centering:	0.89600E+00	0.60000E+05	0.16060E+04	0.61184E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
320.	aC3H5+CH3=aC3H4+CH4			3.00E+12	-0.3	-131.0
321.	aC3H5=CH3CCH2			9.44E+62	-15.5	79079.6
322.	aC3H5=CH3CCHH			5.00E+51	-13.0	73300.0
323.	CH3CCH2+H=pC3H4+H2			3.34E+12	0.0	0.0
324.	CH3CCH2+H=aC3H5+H			5.00E+13	0.0	0.0
325.	CH3CCH2+O=CH3+CH2CO			6.00E+13	0.0	0.0

326.	CH3CCH2+OH=CH3+CH2CO+H	5.00E+12	0.0	0.0
327.	CH3CCH2+O2=CH3CO+CH2O	1.00E+11	0.0	0.0
328.	CH3CCH2+H02=CH3+CH2CO+OH	2.00E+13	0.0	0.0
329.	CH3CCH2+HCO=C3H6+CO	9.00E+13	0.0	0.0
330.	CH3CCH2+CH3=pC3H4+CH4	1.00E+11	0.0	0.0
331.	CH3CCH2=CH3CHCH	1.50E+48	-12.7	53900.0
332.	CH3CHCH+H=pC3H4+H2	3.34E+12	0.0	0.0
333.	CH3CHCH+H=aC3H5+H	5.00E+13	0.0	0.0
334.	CH3CHCH+O=C2H5+CO	6.00E+13	0.0	0.0
335.	CH3CHCH+OH=C2H5+CO+H	5.00E+12	0.0	0.0
336.	CH3CHCH+O2=CH3CHO+HCO	1.00E+11	0.0	0.0
337.	CH3CHCH+H02=C2H5+CO+OH	2.00E+13	0.0	0.0
338.	CH3CHCH+HCO=C3H6+CO	9.00E+13	0.0	0.0
339.	C2H3+HCO=C2H3CHO	1.80E+13	0.0	0.0
340.	CH3CHCH+CH3=pC3H4+CH4	1.00E+11	0.0	0.0
341.	C2H3CHO+H=C2H4+HCO	1.08E+12	0.5	1820.0
342.	C2H3CHO+O=C2H3+OH+CO	3.00E+13	0.0	3540.0
343.	C2H3CHO+O=CH2O+CH2CO	1.90E+07	1.8	220.0
344.	C2H3CHO+OH=C2H3+H2O+CO	3.43E+09	1.2	-447.0
345.	C3H6+H(+M)=n-C3H7(+M)	1.33E+13	0.0	3260.7
	Low pressure limit:	0.62600E+39	-0.66600E+01	0.70000E+04
	TROE centering:	0.10000E+01	0.10000E+04	0.13100E+04 0.48097E+05
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
346.	C3H6+H(+M)=i-C3H7(+M)	1.33E+13	0.0	1559.8
	Low pressure limit:	0.87000E+43	-0.75000E+01	0.47218E+04
	TROE centering:	0.10000E+01	0.10000E+04	0.64540E+03 0.68443E+04
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
347.	C3H6+H=C2H4+CH3	1.60E+22	-2.4	11180.0
348.	C3H6+H=aC3H5+H2	1.70E+05	2.5	2490.0
349.	C3H6+H=CH3CCH2+H2	4.00E+05	2.5	9790.0
350.	C3H6+H=CH3CHCH+H2	8.00E+05	2.5	12280.0
351.	C3H6+O=CH2CO+CH3+H	1.20E+08	1.6	327.0
352.	C3H6+O=C2H5+HCO	3.50E+07	1.6	-972.0
353.	C3H6+O=aC3H5+OH	1.80E+11	0.7	5880.0
354.	C3H6+O=CH3CCH2+OH	6.00E+10	0.7	7630.0
355.	C3H6+O=CH3CHCH+OH	1.20E+11	0.7	8960.0
356.	C3H6+OH=aC3H5+H2O	3.10E+06	2.0	-298.0
357.	C3H6+OH=CH3CCH2+H2O	1.10E+06	2.0	1450.0
358.	C3H6+OH=CH3CHCH+H2O	2.10E+06	2.0	2780.0
359.	C3H6+H02=aC3H5+H2O2	9.60E+03	2.6	13910.0
360.	C3H6+CH3=aC3H5+CH4	2.20E+00	3.5	5675.0
361.	C3H6+CH3=CH3CCH2+CH4	8.40E-01	3.5	11660.0
362.	C3H6+CH3=CH3CHCH+CH4	1.35E+00	3.5	12850.0
363.	C3H6+C2H3=C4H6-1,3+CH3	7.23E+11	0.0	5000.0
364.	n-C3H7+H(+M)=C3H8(+M)	3.60E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.30100E+49	-0.93200E+01	0.58336E+04
	TROE centering:	0.49800E+00	0.13140E+04	0.13140E+04 0.50000E+05
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
365.	n-C3H7+H=C2H5+CH3	3.70E+24	-2.9	12505.0
366.	n-C3H7+H=C3H6+H2	1.80E+12	0.0	0.0
367.	n-C3H7+O=C2H5+CH2O	9.60E+13	0.0	0.0
368.	n-C3H7+OH=C3H6+H2O	2.40E+13	0.0	0.0
369.	n-C3H7+O2=C3H6+H02	9.00E+10	0.0	0.0
370.	n-C3H7+H02=C2H5+OH+CH2O	2.40E+13	0.0	0.0
371.	n-C3H7+HCO=C3H8+CO	6.00E+13	0.0	0.0
372.	n-C3H7+CH3=CH4+C3H6	1.10E+13	0.0	0.0
373.	i-C3H7+H(+M)=C3H8(+M)	2.40E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.17000E+59	-0.12080E+02	0.11264E+05
	TROE centering:	0.64900E+00	0.12130E+04	0.12130E+04 0.11337E+06
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	

	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
374.	i -C3H7+H=CH3+C2H5			1.40E+28	-3.9	15916.0
375.	i -C3H7+H=C3H6+H2			3.20E+12	0.0	0.0
376.	i -C3H7+O=CH3CHO+CH3			9.60E+13	0.0	0.0
377.	i -C3H7+OH=C3H6+H2O			2.40E+13	0.0	0.0
378.	i -C3H7+O2=C3H6+H2O2			1.30E+11	0.0	0.0
379.	i -C3H7+H2O2=CH3CHO+CH3+OH			2.40E+13	0.0	0.0
380.	i -C3H7+HCO=C3H8+CO			1.20E+14	0.0	0.0
381.	i -C3H7+CH3=CH4+C3H6			2.20E+14	-0.7	0.0
382.	CH3+C2H5(+M)=C3H8(+M)			4.90E+14	-0.5	0.0
	Low pressure limit:	0.68000E+62	-0.13420E+02	0.60000E+04		
	TROE centering:	0.10000E+01	0.10000E+04	0.14339E+04	0.53288E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
383.	C3H8+H=H2+n-C3H7			1.30E+06	2.5	6756.0
384.	C3H8+H=H2+i -C3H7			1.30E+06	2.4	4471.0
385.	C3H8+O=n-C3H7+OH			1.90E+05	2.7	3716.0
386.	C3H8+O=i -C3H7+OH			4.76E+04	2.7	2106.0
387.	C3H8+OH=n-C3H7+H2O			1.40E+03	2.7	527.0
388.	C3H8+OH=i -C3H7+H2O			2.70E+04	2.4	393.0
389.	C3H8+O2=n-C3H7+H2O2			4.00E+13	0.0	50930.0
390.	C3H8+O2=i -C3H7+H2O2			4.00E+13	0.0	47590.0
391.	C3H8+H2O2=n-C3H7+H2O2			4.76E+04	2.5	16490.0
392.	C3H8+H2O2=i -C3H7+H2O2			9.64E+03	2.6	13910.0
393.	C3H8+CH3=CH4+n-C3H7			9.03E-01	3.6	7153.0
394.	C3H8+CH3=CH4+i -C3H7			1.51E+00	3.5	5480.0
395.	C4H+H(+M)=C4H2(+M)			1.00E+17	-1.0	0.0
	Low pressure limit:	0.37500E+34	-0.48000E+01	0.19000E+04		
	TROE centering:	0.64640E+00	0.13200E+03	0.13150E+04	0.55660E+04	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
396.	C4H+O=C2H+C2O			5.00E+13	0.0	0.0
397.	C4H+O2=HCCO+C2O			5.00E+13	0.0	1500.0
398.	C4H+H2=H+C4H2			4.90E+05	2.5	560.0
399.	C4H2+H(+M)=n-C4H3(+M)			1.55E+10	0.9	954.0
	Low pressure limit:	0.47000E+48	-0.93690E+01	0.40900E+04		
	TROE centering:	0.20200E+00	0.44700E+03	0.11620E+04	0.26350E+04	
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
400.	C4H2+H(+M)=i -C4H3(+M)			2.20E+10	0.9	164.0
	Low pressure limit:	0.11000E+53	-0.10251E+02	0.46000E+04		
	TROE centering:	0.10000E+01	0.51500E+03	0.51500E+03	0.25500E+04	
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
401.	C4H2+O=C3H2+CO			2.70E+13	0.0	1720.0
402.	C4H2+OH=H2C4O+H			6.60E+12	0.0	-410.0
403.	C4H2+OH=C4H+H2O			3.37E+07	2.0	14000.0
404.	H2C4O+H=C2H2+HCCO			5.00E+13	0.0	3000.0
405.	H2C4O+OH=CH2CO+HCCO			1.00E+07	2.0	2000.0
406.	H2C4O+O=CH2CO+C2O			2.00E+07	1.9	200.0
407.	n-C4H3=i -C4H3			2.46E+45	-10.5	50149.5
408.	n-C4H3+H(+M)=C4H4(+M)			1.00E+14	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.17000E+49	-0.94370E+01	0.74800E+04		
	TROE centering:	0.62000E+00	0.65900E+04	0.27520E+04	0.00000E+00	
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			

	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
409.	n-C4H3+H=i -C4H3+H			9.30E+17	-1.0	6672.7
410.	n-C4H3+H=C2H2+H2CC			7.45E+26	-3.8	8405.2
411.	i -C4H3+H=C2H2+H2CC			2.60E+33	-5.5	14785.7
412.	i -C4H3+H(+M)=C4H4(+M)			1.00E+14	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.11000E+54	-0.10703E+02	0.91000E+04		
	TROE centering:	0.40000E+00	0.56000E+04	0.14340E+04	0.87280E+04	
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H2	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H4	Enhanced by	3.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
413.	n-C4H3+H=C4H2+H2			3.00E+13	0.0	0.0
414.	i -C4H3+H=C4H2+H2			6.00E+13	0.0	0.0
415.	n-C4H3+OH=C4H2+H2O			2.00E+12	0.0	0.0
416.	i -C4H3+OH=C4H2+H2O			4.00E+12	0.0	0.0
417.	i -C4H3+O2=HCCO+CH2CO			7.86E+16	-1.8	0.0
418.	C4H4+H=n-C4H5			1.30E+51	-11.9	16500.0
419.	C4H4+H=i -C4H5			4.90E+51	-11.9	17700.0
420.	C4H4+H=n-C4H3+H2			6.65E+05	2.5	12240.0
421.	C4H4+H=i -C4H3+H2			3.33E+05	2.5	9240.0
422.	C4H4+O=C3H3+HCO			1.50E+13	0.0	1808.0
423.	C4H4+OH=n-C4H3+H2O			3.10E+07	2.0	3430.0
424.	C4H4+OH=i -C4H3+H2O			1.55E+07	2.0	430.0
425.	C4H4+CH3=n-C4H3+CH4			3.98E+11	0.0	4972.0
426.	C4H4+CH3=i -C4H3+CH4			3.98E+11	0.0	4972.0
427.	C4H4+C2H=n-C4H3+C2H2			3.90E+13	0.0	0.0
428.	C4H4+C2H=i -C4H3+C2H2			3.90E+13	0.0	0.0
429.	n-C4H5=i -C4H5			1.50E+67	-16.9	59100.0
430.	n-C4H5+H=i -C4H5+H			3.10E+26	-3.4	17423.0
431.	C4H6-1, 3=i -C4H5+H			5.70E+36	-6.3	112353.0
432.	C4H6-1, 3=n-C4H5+H			5.30E+44	-8.6	123608.0
433.	n-C4H5+H=C4H4+H2			1.50E+13	0.0	0.0
434.	i -C4H5+H=C4H4+H2			3.00E+13	0.0	0.0
435.	n-C4H5+OH=C4H4+H2O			2.00E+12	0.0	0.0
436.	i -C4H5+OH=C4H4+H2O			4.00E+12	0.0	0.0
437.	n-C4H5+HCO=C4H6-1, 3+CO			5.00E+12	0.0	0.0
438.	i -C4H5+HCO=C4H6-1, 3+CO			5.00E+12	0.0	0.0
439.	n-C4H5+HO2=C2H3+CH2CO+OH			6.60E+12	0.0	0.0
440.	i -C4H5+HO2=C2H3+CH2CO+OH			6.60E+12	0.0	0.0
441.	n-C4H5+H2O2=C4H6-1, 3+HO2			1.21E+10	0.0	-596.0
442.	i -C4H5+H2O2=C4H6-1, 3+HO2			1.21E+10	0.0	-596.0
443.	C4H6-1, 3+H=n-C4H5+H2			1.33E+06	2.5	12240.0
444.	C4H6-1, 3+H=i -C4H5+H2			6.65E+05	2.5	9240.0
445.	C4H6-1, 3+H=PC3H4+CH3			7.00E+12	0.0	8000.0
446.	C4H6-1, 3+O=n-C4H5+OH			7.50E+06	1.9	3740.0
447.	C4H6-1, 3+O=i -C4H5+OH			7.50E+06	1.9	3740.0
448.	C4H6-1, 3+OH=n-C4H5+H2O			6.20E+06	2.0	3430.0
449.	C4H6-1, 3+OH=i -C4H5+H2O			3.10E+06	2.0	430.0
450.	C4H6-1, 3+CH3=i -C4H5+CH4			7.00E+13	0.0	15500.0
451.	C4H6-1, 3+CH3=n-C4H5+CH4			7.00E+13	0.0	18500.0
452.	C4H6-1, 3+HCO=C4H7+CO			3.50E+11	0.0	4000.0
453.	C4H6-1, 2+H=C4H6-1, 3+H			2.00E+13	0.0	4000.0
454.	C4H6-1, 2+H=i -C4H5+H2			1.70E+05	2.5	2490.0
455.	C4H6-1, 2+H=aC3H4+CH3			2.00E+13	0.0	2000.0
456.	C4H6-1, 2+H=PC3H4+CH3			2.00E+13	0.0	2000.0
457.	C4H6-1, 2+O=CH2CO+C2H4			1.20E+08	1.6	327.0
458.	C4H6-1, 2+O=i -C4H5+OH			1.80E+11	0.7	5880.0
459.	C4H6-1, 2+OH=i -C4H5+H2O			3.10E+06	2.0	-298.0
460.	C4H6-1, 2+CH3=i -C4H5+CH4			7.00E+13	0.0	18500.0
461.	C4H6-1, 2=C4H6-1, 3			3.00E+13	0.0	65000.0
462.	C4H7=C4H6-1, 3+H			2.28E+52	-12.0	51230.0
463.	C4H7+H(+M)=C4H8-1(+M)			3.60E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.30100E+49	-0.93200E+01	0.58336E+04		
	TROE centering:	0.49800E+00	0.13140E+04	0.13140E+04	0.50000E+05	
	AR	Enhanced by	7.000E-01			
	CO	Enhanced by	1.500E+00			
	CO2	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00			
464.	C4H7+H=CH3+aC3H5			2.00E+21	-2.0	11000.0
465.	C4H7+H=C4H6-1, 3+H2			1.80E+12	0.0	0.0
466.	C4H7+O2=C4H6-1, 3+HO2			1.00E+11	0.0	0.0
467.	C4H7+HO2=CH2O+OH+aC3H5			2.40E+13	0.0	0.0
468.	C4H7+HCO=C4H8-1+CO			6.00E+13	0.0	0.0
469.	C4H7+CH3=C4H6-1, 3+CH4			1.10E+13	0.0	0.0

470.	C2H3+C2H5(+M)=C4H8-1(+M)	1.50E+13	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.15500E+57	-0.11790E+02	0.89845E+04
	TR0E centering:	0.19800E+00	0.22779E+04	0.60000E+05
	AR	Enhanced by	7.000E-01	
	CO	Enhanced by	1.500E+00	
	CO2	Enhanced by	2.000E+00	
	H2O	Enhanced by	6.000E+00	
	H2	Enhanced by	2.000E+00	
	CH4	Enhanced by	2.000E+00	
	C2H6	Enhanced by	3.000E+00	
471.	C2H3+C2H5=aC3H5+CH3	3.90E+32	-5.2	19747.0
472.	C4H8-1+H=C2H4+C2H5	1.60E+22	-2.4	11180.0
473.	C4H8-1+H=C3H6+CH3	3.20E+22	-2.4	11180.0
474.	C4H8-1+H=C4H7+H2	6.50E+05	2.5	6756.0
475.	C4H8-1+O=n-C3H7+HCO	3.30E+08	1.4	-402.0
476.	C4H8-1+O=C4H7+OH	1.50E+13	0.0	5760.0
	Declared duplicate reaction...			
477.	C4H8-1+O=C4H7+OH	2.60E+13	0.0	4470.0
	Declared duplicate reaction...			
478.	C4H8-1+OH=C4H7+H2O	7.00E+02	2.7	527.0
479.	C4H8-1+O2=C4H7+H2O2	2.00E+13	0.0	50930.0
480.	C4H8-1+H2O2=C4H7+H2O2	1.50E+11	0.0	14900.0
481.	C4H8-1+CH3=C4H7+CH4	4.50E-01	3.6	7153.0
482.	C4H2+C2H=C6H2+H	9.60E+13	0.0	0.0
483.	C4H2+C2H=C6H3	4.50E+37	-7.7	7100.0
484.	n-C4H3+C2H2=I-C6H4+H	2.50E+14	-0.6	10600.0
485.	n-C4H3+C2H2=C6H5	9.60E+70	-17.8	31300.0
486.	n-C4H3+C2H2=c-C6H4+H	6.90E+46	-10.0	30100.0
487.	C4H4+C2H=I-C6H4+H	1.20E+13	0.0	0.0
488.	n-C4H5+C2H2=C6H6+H	1.60E+16	-1.3	5400.0
489.	n-C4H5+C2H3=C6H6+H2	1.84E+13	0.0	7070.0
490.	C4H6-1,3+C2H3=C6H6+H2+H	2.23E+07	1.3	1369.0
491.	C6H2+H=C6H3	1.10E+30	-4.9	10800.0
492.	C6H3+H=C4H2+C2H2	2.80E+23	-2.5	10780.0
493.	C6H3+H=I-C6H4	3.40E+43	-9.0	12120.0
494.	C6H3+H=C6H2+H2	3.00E+13	0.0	0.0
495.	C6H3+OH=C6H2+H2O	4.00E+12	0.0	0.0
496.	C6H3+O2=>CO+C3H2+HCCO	5.00E+11	0.0	0.0
497.	I-C6H4+H=C6H5	1.70E+78	-19.7	31400.0
498.	I-C6H4+H=c-C6H4+H	1.40E+54	-11.7	34500.0
499.	I-C6H4+H=C6H3+H2	1.33E+06	2.5	9240.0
500.	I-C6H4+OH=C6H3+H2O	3.10E+06	2.0	430.0
501.	c-C6H4=C4H2+C2H2	2.00E+15	0.0	80000.0
502.	C6H5CH3=C6H5+CH3	1.40E+16	0.0	99800.0
503.	C6H5CH3+O2=C6H5CH2+HO2	3.00E+14	0.0	42992.0
504.	C6H5CH3+OH=C6H5CH2+H2O	1.26E+13	0.0	2583.0
505.	C6H5CH3+H=C6H5CH2+H2	1.20E+14	0.0	8235.0
506.	C6H5CH3+H=C6H6+CH3	1.20E+13	0.0	5148.0
507.	C6H5CH3+O=OC6H4CH3+H	1.63E+13	0.0	3418.0
508.	C6H5CH3+CH3=C6H5CH2+CH4	3.16E+11	0.0	9500.0
509.	C6H5CH3+C6H5=C6H5CH2+C6H6	2.10E+12	0.0	4400.0
510.	C6H5CH2+H=C6H5CH3	2.60E+14	0.0	0.0
511.	C6H5CH2+O=C6H5CHO+H	4.00E+14	0.0	0.0
512.	C6H5CH2+OH=C6H5CH2OH	2.00E+13	0.0	0.0
513.	C6H5CH2+HO2=C6H5CHO+H+OH	5.00E+12	0.0	0.0
514.	C6H5CH2+C6H5CH2=bi-C6H5CH2	2.51E+11	0.4	0.0
515.	C6H5CH2+C6H5OH=C6H5CH3+C6H5O	1.05E+11	0.0	9500.0
516.	C6H5CH2+HOC6H4CH3=C6H5CH3+OC6H4CH3	1.05E+11	0.0	9500.0
517.	C6H5C2H5=C6H5CH2+CH3	2.00E+15	0.0	72700.0
518.	C6H5CH2OH+O2=C6H5CHO+HO2+H	2.00E+14	0.0	41400.0
519.	C6H5CH2OH+OH=C6H5CHO+H2O+H	5.00E+12	0.0	0.0
520.	C6H5CH2OH+H=C6H5CHO+H2+H	8.00E+13	0.0	8235.0
521.	C6H5CH2OH+H=C6H6+CH2OH	1.20E+13	0.0	5148.0
522.	C6H5CH2OH+C6H5CH2=C6H5CHO+C6H5CH3+H	2.11E+11	0.0	9500.0
523.	C6H5CH2OH+C6H5=C6H5CHO+C6H6+H	1.40E+12	0.0	4400.0
524.	C6H5CHO+O2=C6H5CO+HO2	1.02E+13	0.0	38950.0
525.	C6H5CHO+OH=C6H5CO+H2O	1.71E+09	1.2	-447.0
526.	C6H5CHO+H=C6H5CO+H2	5.00E+13	0.0	4928.0
527.	C6H5CHO+H=C6H6+HCO	1.20E+13	0.0	5148.0
528.	C6H5CHO+O=C6H5CO+OH	9.04E+12	0.0	3080.0
529.	C6H5CHO+C6H5CH2=C6H5CO+C6H5CH3	2.77E+03	2.8	5773.0
530.	C6H5CHO+CH3=C6H5CO+CH4	2.77E+03	2.8	5773.0
531.	C6H5CHO+C6H5=C6H5CO+C6H6	7.01E+11	0.0	4400.0
532.	C6H5C2H5+OH=C6H5C2H3+H2O+H	8.43E+12	0.0	2583.0
533.	C6H5C2H5+H=C6H5C2H3+H2+H	8.00E+13	0.0	8235.0
534.	C6H5C2H5+O2=C6H5C2H3+HO2+H	2.00E+14	0.0	41400.0
535.	OC6H4CH3+H=HOC6H4CH3	2.50E+14	0.0	0.0
536.	OC6H4CH3=C6H6+H+CO	2.51E+11	0.0	43900.0
537.	HOC6H4CH3+OH=OC6H4CH3+H2O	6.00E+12	0.0	0.0
538.	HOC6H4CH3+H=OC6H4CH3+H2	1.15E+14	0.0	12400.0
539.	HOC6H4CH3+H=C6H5CH3+OH	2.21E+13	0.0	7910.0
540.	HOC6H4CH3+H=C6H5OH+CH3	1.20E+13	0.0	5148.0
541.	C6H5CO=C6H5+CO	3.98E+14	0.0	29400.0

542.	C6H5+H(+M)=C6H6(+M)			1.00E+14	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.66000E+76	-0.16300E+02	0.70000E+04		
	TROE centering:	0.10000E+01	0.00000E+00	0.15849E+04	0.61130E+04	
	C0	Enhanced by	1.500E+00			
	C02	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
543.	C6H6+O2=C6H5+H2O			6.30E+13	0.0	60000.0
544.	C6H6+OH=C6H5+H2O			1.60E+08	1.4	1450.0
545.	C6H6+O=C6H5+H			1.10E+13	0.0	4530.0
546.	C6H6+O=C5H5+HCO			1.10E+13	0.0	4530.0
547.	C6H6+O=C6H5OH			1.10E+13	0.0	4530.0
548.	C6H5+H2=C6H6+H			5.71E+04	2.4	6273.0
549.	C6H5=c-C6H4+H			3.70E+74	-17.1	118200.0
550.	C6H5+O2=C6H5O+O			2.60E+13	0.0	6120.0
551.	C6H5+O2=C6H4O2+H			3.00E+13	0.0	8980.0
552.	C6H5+O=C5H5+CO			1.00E+14	0.0	0.0
553.	C6H5+OH=C6H5O+H			3.00E+13	0.0	0.0
554.	C6H5+HO2=C6H5O+OH			3.00E+13	0.0	0.0
555.	C6H5+C6H5=P2			2.00E+19	-2.0	2900.0
556.	C6H6+C6H5=P2+H			1.10E+23	-2.9	15890.0
557.	C6H4O2=C5H4O+CO			7.40E+11	0.0	59000.0
558.	C6H4O2+H=C0+C5H5O-1,3			4.30E+09	1.4	3900.0
559.	C6H4O2+O=2CO+C2H2+CH2CO			3.00E+13	0.0	5000.0
560.	C6H5O=CO+C5H5			3.76E+54	-12.1	74300.0
561.	C6H5O+H(+M)=C6H5OH(+M)			2.50E+14	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.10000E+95	-0.21840E+02	0.13880E+05		
	TROE centering:	0.43000E-01	0.30420E+03	0.60000E+05	0.58964E+04	
	C0	Enhanced by	1.500E+00			
	C02	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
562.	C6H5O+O=C6H4O2+H			1.68E+14	0.0	0.0
563.	C6H5OH+OH=C6H5O+H2O			2.95E+06	2.0	-1312.0
564.	C6H6+OH=C6H5OH+H			1.30E+13	0.0	10600.0
565.	C6H5OH+H=C6H5O+H2			1.15E+14	0.0	12398.0
566.	C6H5OH+O=C6H5O+OH			2.81E+13	0.0	7352.0
567.	C6H5OH+C2H3=C6H5O+C2H4			6.00E+12	0.0	0.0
568.	C6H5OH+n-C4H5=C6H5O+C4H6-1,3			6.00E+12	0.0	0.0
569.	C6H5OH+C6H5=C6H5O+C6H6			4.91E+12	0.0	4400.0
570.	C5H6+H=C2H2+aC3H5			2.44E+73	-17.9	31500.0
571.	C5H6+H=l-C5H7			1.14E+14	-0.2	3100.0
572.	C5H6+H=C5H5+H2			1.20E+05	2.5	1492.0
573.	C5H6+O=C5H5+OH			4.77E+04	2.7	1106.0
574.	C5H6+O=C5H5O-1,3+H			8.91E+12	-0.1	590.0
	Declared duplicate reaction...					
575.	C5H6+O=C5H5O-1,3+H			5.60E+12	-0.1	200.0
	Declared duplicate reaction...					
576.	C5H6+O=n-C4H5+CO+H			8.70E+51	-11.1	33240.0
577.	C5H6+OH=C5H5+H2O			3.08E+06	2.0	0.0
578.	C5H6+HO2=C5H5+H2O2			1.10E+04	2.6	12900.0
579.	C5H6+O2=C5H5+H2			4.00E+13	0.0	37150.0
580.	C5H6+HCO=C5H5+CH2O			1.08E+08	1.9	16000.0
581.	C5H6+CH3=C5H5+CH4			1.80E-01	4.0	0.0
582.	C5H5+H(+M)=C5H6(+M)			1.00E+14	0.0	0.0
	Low pressure limit:	0.44000E+81	-0.18280E+02	0.12994E+05		
	TROE centering:	0.68000E-01	0.40070E+03	0.41358E+04	0.55019E+04	
	C0	Enhanced by	1.500E+00			
	C02	Enhanced by	2.000E+00			
	H2O	Enhanced by	6.000E+00			
	H2	Enhanced by	2.000E+00			
	CH4	Enhanced by	2.000E+00			
583.	C5H5+O=n-C4H5+CO			3.20E+13	-0.2	440.0
584.	C5H5+O=C5H4O+H			5.81E+13	0.0	20.0
585.	C5H5+OH=C5H4OH+H			3.51E+57	-12.2	48350.0
586.	C5H5+OH=C5H5OH			6.49E+14	-0.8	-2730.0
	Declared duplicate reaction...					
587.	C5H5+OH=C5H5OH			1.15E+43	-8.8	18730.0
	Declared duplicate reaction...					
588.	C5H5+OH=C5H5OH			1.06E+59	-13.1	33450.0
	Declared duplicate reaction...					
589.	C5H5+HO2=C5H5O-2,4+OH			6.27E+29	-4.7	11650.0
590.	C5H5+O2=C5H4O+OH			1.80E+12	0.1	18000.0
591.	C5H5OH+H=C5H5O-2,4+H2			1.15E+14	0.0	12400.0
592.	C5H5OH+H=C5H4OH+H2			1.20E+05	2.5	1492.0
593.	C5H5OH+OH=C5H5O-2,4+H2O			6.00E+12	0.0	0.0
594.	C5H5OH+OH=C5H4OH+H2O			3.08E+06	2.0	0.0
595.	C5H5O-2,4+H=C5H5OH			1.00E+14	0.0	0.0
596.	C5H5O-2,4=C5H4O+H			2.00E+13	0.0	30000.0
597.	C5H5O-2,4+O2=C5H4O+HO2			1.00E+11	0.0	0.0
598.	C5H4O+H=C5H5O-1,3			2.00E+13	0.0	2000.0

599.	C5H50-1, 3=c-C4H5+CO	1.00E+12	0.0	36000.0
600.	C5H50-1, 3+O2=C5H40+H02	1.00E+11	0.0	0.0
601.	C5H40H=C5H40+H	2.10E+13	0.0	48000.0
602.	C5H40=bi -C5H40	5.70E+32	-6.8	68500.0
603.	C5H40=C4H4+CO	6.20E+41	-7.9	98700.0
604.	bi -C5H40=C4H4+CO	6.90E+43	-9.0	56600.0
605.	C5H40+H=CO+c-C4H5	4.30E+09	1.4	3900.0
606.	C5H40+O=CO+HCO+C3H3	6.20E+08	1.4	-858.0
607.	c-C4H5+H=C4H6-1, 3	1.00E+13	0.0	0.0
608.	c-C4H5+H=C2H4+C2H2	1.00E+13	0.0	0.0
609.	c-C4H5+O=CH2CHO+C2H2	1.00E+14	0.0	0.0
610.	c-C4H5+O2=CH2CHO+CH2CO	4.80E+11	0.0	19000.0
611.	c-C4H5=C4H4+H	3.00E+12	0.0	52000.0
612.	c-C4H5=C2H3+C2H2	2.00E+12	0.0	58000.0
613.	I -C5H7+H=I -C5H6+H2	2.00E+13	0.0	0.0
614.	I -C5H7+O2=CH2CHO+C2H3CHO	1.00E+11	0.0	0.0
615.	I -C5H6+H=I -C5H7	2.00E+13	0.0	3000.0
616.	I -C5H6+H=C2H4+C3H3	2.00E+13	0.0	3000.0
617.	I -C5H6+H02=I -C5H7+O2	1.00E+11	0.0	0.0

NOTE: A uni ts mole-cm-sec-K, E uni ts cal /mole

NO ERRORS FOUND ON INPUT:
ASCII Vers. 1.2 CHEMKIN linkfile chem.asc written.

3. Data Termodinamika Oksidasi dan Pembakaran Toluena

THERMO									
	300.000	1000.000	5000.000						
N2		N 2		G	300	5000	1000		1
0.	29266400E+01	0.14879768E-02	-0.56847603E-06	0.10097038E-09	-0.67533509E-14				2
-0.	92279773E+03	0.59805279E+01	0.32986770E+01	0.14082404E-02	-0.39632218E-05				3
0.	56415148E-08	-0.24448540E-11	-0.10208999E+04	0.39503720E+01					4
AR		AR 2		G	300	5000	1000		1
0.	25000000E+01	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00			2
-0.	74537500E+03	0.43660002E+01	0.25000000E+01	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00			3
0.	00000000E+00	0.00000000E+00	-0.74537500E+03	0.43660002E+01					4
O		O 1		G	200	3500	1000		1
0.	25694208E+01	-0.85974112E-04	0.41948457E-07	-0.10017780E-10	0.12283369E-14				2
0.	29217578E+05	0.47843385E+01	0.31682670E+01	-0.32793188E-02	0.66430639E-05				3
-0.	61280661E-08	0.21126597E-11	0.29122260E+05	0.20519335E+01					4
O2		O 2		G	200	3500	1000		1
0.	32825379E+01	0.14830875E-02	-0.75796669E-06	0.20947055E-09	-0.21671780E-13				2
-0.	10884578E+04	0.54532313E+01	0.37824564E+01	-0.29967341E-02	0.98473020E-05				3
-0.	96812949E-08	0.32437284E-11	-0.10639436E+04	0.36576757E+01					4
H		H 1		G	200	3500	1000		1
0.	25000000E+01	-0.23084297E-10	0.16156195E-13	-0.47351524E-17	0.49819734E-21				2
0.	25473660E+05	-0.44668290E+00	0.25000000E+01	0.70533282E-12	-0.19959196E-14				3
0.	23008163E-17	-0.92773233E-21	0.25473660E+05	-0.44668284E+00					4
H2		H 2		G	200	3500	1000		1
0.	33372791E+01	-0.49402472E-04	0.49945680E-06	-0.17956639E-09	0.20025538E-13				2
-0.	95015894E+03	-0.32050233E+01	0.23443310E+01	0.79805208E-02	-0.19478151E-04				3
0.	20157209E-07	-0.73761179E-11	-0.91793518E+03	0.68301022E+00					4
OH		O 1H 1		G	200	3500	1000		1
0.	30928876E+01	0.54842973E-03	0.12650523E-06	-0.87946157E-10	0.11741238E-13				2
0.	38586570E+04	0.44766960E+01	0.39920154E+01	-0.24013175E-02	0.46179384E-05				3
-0.	38811332E-08	0.13641147E-11	0.36150806E+04	-0.10392546E+00					4
H2O		O 1H 2		G	200	3500	1000		1
0.	30339925E+01	0.21769181E-02	-0.16407252E-06	-0.97041986E-10	0.16820099E-13				2
-0.	30004297E+05	0.49667702E+01	0.41986403E+01	-0.20364341E-02	0.65204022E-05				3
-0.	54879705E-08	0.17719782E-11	-0.30293727E+05	-0.84903222E+00					4
HO2		O 2H 1		G	200	3500	1000		1
0.	40172110E+01	0.22398201E-02	-0.63365815E-06	0.11424637E-09	-0.10790853E-13				2
0.	11185671E+03	0.37851021E+01	0.43017979E+01	-0.47491207E-02	0.21158288E-04				3
-0.	24276389E-07	0.92922510E-11	0.29480804E+03	0.37166624E+01					4
H2O2		O 2H 2		G	200	3500	1000		1
0.	41650028E+01	0.49083168E-02	-0.19013922E-05	0.37118600E-09	-0.28790829E-13				2
-0.	17861787E+05	0.29161565E+01	0.42761126E+01	-0.54282241E-03	0.16733569E-04				3
-0.	21577081E-07	0.86245438E-11	-0.17702582E+05	0.34350507E+01					4
C		C 1		G	200	3500	1000		1
0.	24926689E+01	0.47988928E-04	-0.72433501E-07	0.37429101E-10	-0.48727790E-14				2
0.	85451297E+05	0.48015037E+01	0.25542395E+01	-0.32153772E-03	0.73379226E-06				3
-0.	73223488E-09	0.26652145E-12	0.85443883E+05	0.45313087E+01					4
CH		C 1H 1		G	200	3500	1000		1
0.	28784647E+01	0.97091368E-03	0.14444565E-06	-0.13068785E-09	0.17607938E-13				2
0.	71012438E+05	0.54849801E+01	0.34898167E+01	0.32383553E-03	-0.16889907E-05				3
0.	31621732E-08	-0.14060906E-11	0.70797297E+05	0.20840111E+01					4

CH2	C	1H	2	G	200	3500	1000	1	
0.28741012E+01	0.36563929E-02	0.14089460E-05	0.26017954E-09	0.18772757E-13	2				
0.46263605E+05	0.61711931E+01	0.37626786E+01	0.96887216E-03	0.27948984E-05	3				
-0.38509116E-08	0.16874172E-11	0.46004039E+05	0.15625318E+01		4				
CH2*	C	1H	2	G	200	3500	1000	1	
0.22920384E+01	0.46558864E-02	0.20119194E-05	0.41790599E-09	0.33971635E-13	2				
0.50926000E+05	0.86265020E+01	0.41986041E+01	0.23666143E-02	0.82329625E-05	3				
-0.66881598E-08	0.19431475E-11	0.50496816E+05	0.76911896E+00		4				
CH3	C	1H	3	G	200	3500	1000	1	
0.22857177E+01	0.72399005E-02	0.29871435E-05	0.59568467E-09	0.46715439E-13	2				
0.16775584E+05	0.84800720E+01	0.36735904E+01	0.20109517E-02	0.57302186E-05	3				
-0.68711743E-08	0.25438573E-11	0.16444998E+05	0.16045643E+01		4				
CH4	C	1H	4	G	200	3500	1000	1	
0.74851498E-01	0.13390947E-01	0.57328580E-05	0.12229253E-08	0.10181523E-12	2				
-0.94683447E+04	0.18437319E+02	0.51498761E+01	0.13670979E-01	0.49180060E-04	3				
-0.48474302E-07	0.16669395E-10	0.10246647E+05	0.46413035E+01		4				
CO	C	10	1	G	200	3500	1000	1	
0.27151856E+01	0.20625275E-02	0.99882573E-06	0.23005300E-09	0.20364771E-13	2				
-0.14151872E+05	0.78186879E+01	0.35795336E+01	0.61035366E-03	0.10168143E-05	3				
0.90700586E-09	0.90442448E-12	0.14344086E+05	0.35084093E+01		4				
CO2	C	10	2	G	200	3500	1000	1	
0.38574603E+01	0.44143703E-02	0.22148140E-05	0.52349020E-09	0.47208416E-13	2				
-0.48759164E+05	0.22716382E+01	0.23567736E+01	0.89845965E-02	0.71235627E-05	3				
0.24591902E-08	0.14369955E-12	0.48371969E+05	0.99010525E+01		4				
HCO	C	1H	10	1	G	200	3500	1000	1
0.27721744E+01	0.49569551E-02	0.24844562E-05	0.58916177E-09	0.53350872E-13	2				
0.40119182E+04	0.97983446E+01	0.42211857E+01	0.32439253E-02	0.13779944E-04	3				
-0.13314409E-07	0.43376886E-11	0.38395649E+04	0.33943725E+01		4				
CH2O	C	1H	20	1	G	200	3500	1000	1
0.17606901E+01	0.92000011E-02	0.44225881E-05	0.10064121E-08	0.88385564E-13	2				
-0.13995832E+05	0.13656323E+02	0.47937231E+01	0.99083334E-02	0.37321999E-04	3				
-0.37928526E-07	0.13177265E-10	0.14308957E+05	0.60281289E+00		4				
CH2OH	C	1H	30	1	G	200	3500	1000	1
0.36926656E+01	0.86457683E-02	0.37510113E-05	0.78723461E-09	0.64855422E-13	2				
-0.32425063E+04	0.58104320E+01	0.38638892E+01	0.55967229E-02	0.59327181E-05	3				
0.10453201E-07	0.43696726E-11	0.31939136E+04	0.54730225E+01		4				
CH3O	C	1H	30	1	G	200	3000	1000	1
0.37707989E+01	0.78714974E-02	0.26563839E-05	0.39444309E-09	0.21126160E-13	2				
0.12783252E+03	0.29295750E+01	0.21062040E+01	0.72165951E-02	0.53384720E-05	3				
-0.73776358E-08	0.20756101E-11	0.97860107E+03	0.13152177E+02		4				
CH3OH	C	1H	40	1	G	200	3500	1000	1
0.17897079E+01	0.14093829E-01	0.63650082E-05	0.13817109E-08	0.11706022E-12	2				
-0.25374875E+05	0.14502362E+02	0.57153959E+01	0.15230913E-01	0.65244116E-04	3				
-0.71080692E-07	0.26135269E-10	0.25642766E+05	0.15040982E+01		4				
C2H	C	2H	1	G	200	3500	1000	1	
0.31678066E+01	0.47522192E-02	0.18378707E-05	0.30419026E-09	0.17723277E-13	2				
0.67121062E+05	0.66358948E+01	0.28896573E+01	0.13409961E-01	0.28476950E-04	3				
0.29479105E-07	0.10933151E-10	0.66839391E+05	0.62229643E+01		4				
C2H2	C	2H	2	G	200	3500	1000	1	
0.41475697E+01	0.59616668E-02	0.23729485E-05	0.46741216E-09	0.36123523E-13	2				
0.25936000E+05	0.12302812E+01	0.80868107E+00	0.23361564E-01	0.35517183E-04	3				
0.28015243E-07	0.85007296E-11	0.26428980E+05	0.13939705E+02		4				
H2CC	C	2H	2	G	200	5000	1000	1	
0.42780342E+01	0.47562802E-02	0.16301009E-05	0.25462807E-09	0.14886379E-13	2				
0.48316688E+05	0.64023703E+00	0.32815483E+01	0.69764792E-02	0.23855243E-05	3				
-0.12104432E-08	0.98189545E-12	0.48621793E+05	0.59203911E+01		4				
C2H3	C	2H	3	G	200	3500	1000	1	
0.30167241E+01	0.10330229E-01	0.46808236E-05	0.10176329E-08	0.86260704E-13	2				
0.34612875E+05	0.77873240E+01	0.32124665E+01	0.15147916E-02	0.25920941E-04	3				
-0.35765783E-07	0.14715087E-10	0.34859848E+05	0.85105400E+01		4				
C2H4	C	2H	4	G	200	3500	1000	1	
0.20361111E+01	0.14645415E-01	0.67107790E-05	0.14722292E-08	0.12570606E-12	2				
0.49398862E+04	0.10305369E+02	0.39592016E+01	0.75705224E-02	0.57099031E-04	3				
-0.69158872E-07	0.26988438E-10	0.50897759E+04	0.40973310E+01		4				
C2H5	C	2H	5	G	200	3500	1000	1	
0.19546564E+01	0.17397271E-01	0.79820666E-05	0.17521768E-08	0.14964157E-12	2				
0.12857520E+05	0.13462435E+02	0.43064656E+01	0.41865888E-02	0.49714279E-04	3				
-0.59912658E-07	0.23050900E-10	0.12841627E+05	0.47072091E+01		4				
C2H6	C	2H	6	G	200	3500	1000	1	
0.10718815E+01	0.21685267E-01	0.10025607E-04	0.22141200E-08	0.19000289E-12	2				
-0.11426394E+05	0.15115611E+02	0.42914248E+01	0.55015427E-02	0.59943828E-04	3				
-0.70846632E-07	0.26868577E-10	0.11522205E+05	0.26668231E+01		4				
CH2CO	C	2H	20	1	G	200	3500	1000	1
0.45112972E+01	0.90035973E-02	0.41693966E-05	0.92334590E-09	0.79483817E-13	2				
-0.75510532E+04	0.63224721E+00	0.21358364E+01	0.18118871E-01	0.17394748E-04	3				
0.93439754E-08	0.20145762E-11	0.70429180E+04	0.12215648E+02		4				
HCCO	C	2H	10	1	G	300	4000	1000	1
0.56282058E+01	0.40853401E-02	0.15934547E-05	0.28626052E-09	0.19407832E-13	2				
0.19327215E+05	0.39302595E+01	0.22517214E+01	0.17655021E-01	0.23729101E-04	3				
0.17275759E-07	0.50664811E-11	0.20059449E+05	0.12490417E+02		4				
HCCOH	C	2H	20	1	G	300	5000	1000	1
0.59238291E+01	0.67923600E-02	0.25658564E-05	0.44987841E-09	0.29940101E-13	2				
0.72646260E+04	0.76017742E+01	0.12423733E+01	0.31072201E-01	0.50866864E-04	3				

0. 43137131E-07-0. 14014594E-10	0. 80316143E+04	0. 13874319E+02	4
CH3CO	C 2H 30 1 G	200 5000 1000	1
0. 59447732E+01 0. 78667207E-02-0. 28865882E-05	0. 47270876E-09-0. 28599861E-13		2
-0. 37873076E+04-0. 50136752E+01 0. 41634259E+01-0. 23261610E-03	0. 34267821E-04		3
-0. 44105228E-07 0. 17275611E-10-0. 26574529E+04	0. 73468280E+01		4
CH3CHO	C 2H 40 1 G	200 5000 1000	1
0. 54041109E+01 0. 11723059E-01-0. 42263136E-05	0. 68372452E-09-0. 40984861E-13		2
-0. 22593121E+05-0. 34807918E+01 0. 47294593E+01-0. 31932858E-02	0. 47534922E-04		3
-0. 57458610E-07 0. 21931111E-10-0. 21572879E+05	0. 41030159E+01		4
C2H3CHO	C 3H 40 1 G	298 3000 1000	1
0. 48353181E+01 0. 19772600E-01-0. 10426628E-04	0. 26525804E-08-0. 26278206E-12		2
-0. 11557837E+05 0. 18853143E+01 0. 11529584E+01	0. 28040214E-01-0. 15072153E-04		3
0. 15905842E-08 0. 84930370E-12-0. 10417694E+05	0. 21453279E+02		4
aC3H5	C 3H 5 G	300 3000 1000	1
0. 65007877E+01 0. 14324731E-01-0. 56781632E-05	0. 11080801E-08-0. 90363887E-13		2
0. 17482449E+05-0. 11243050E+02 0. 13631835E+01	0. 19813821E-01 0. 12497060E-04		3
-0. 33355555E-07 0. 15846571E-10 0. 19245629E+05	0. 17173214E+02		4
CH3CCH2	C 3H 5 G	300 3000 1000	1
0. 54255528E+01 0. 15511072E-01-0. 56678350E-05	0. 79224388E-09-0. 16878034E-13		2
0. 27843027E+05-0. 33527184E+01 0. 17329209E+01	0. 22394620E-01-0. 51490611E-05		3
-0. 67596466E-08 0. 38253211E-11 0. 29040498E+05	0. 16568878E+02		4
CH3CHCH	C 3H 5 G	300 3000 1000	1
0. 53725281E+01 0. 15780509E-01-0. 59922850E-05	0. 93089664E-09-0. 36550966E-13		2
0. 29614760E+05-0. 34186478E+01 0. 91372931E+00	0. 26432343E-01-0. 11758950E-04		3
-0. 23035678E-08 0. 27715488E-11 0. 30916867E+05	0. 19989269E+02		4
C3H6	C 3H 6 G	300 5000 1000	1
0. 67322569E+01 0. 14908340E-01-0. 49498990E-05	0. 72120221E-09-0. 37662039E-13		2
-0. 92357031E+03-0. 13313350E+02 0. 14933070E+01	0. 20925179E-01 0. 44867938E-05		3
-0. 16689119E-07 0. 71581460E-11 0. 10748260E+04	0. 16145340E+02		4
n-C3H7	C 3H 7 G	300 3000 1000	1
0. 77097478E+01 0. 16031485E-01-0. 52720238E-05	0. 75888351E-09-0. 38862719E-13		2
0. 79762236E+04-0. 15515297E+02 0. 10491173E+01	0. 26008973E-01 0. 23542516E-05		3
-0. 19595133E-07 0. 93720205E-11 0. 10312346E+05	0. 21136034E+02		4
i-C3H7	C 3H 7 G	300 3000 1000	1
0. 65192742E+01 0. 17220104E-01-0. 57364218E-05	0. 84130730E-09-0. 44565913E-13		2
0. 73227192E+04-0. 90830212E+01 0. 14449199E+01	0. 20999111E-01 0. 77036220E-05		3
-0. 18476253E-07 0. 71282962E-11 0. 94223721E+04	0. 20116318E+02		4
C3H8	C 3H 8 G	300 3000 1000	1
0. 75244150E+01 0. 18898282E-01-0. 62921040E-05	0. 92161456E-09-0. 48684479E-13		2
-0. 16564395E+05-0. 17838375E+02 0. 92851090E+00	0. 26460566E-01 0. 60332445E-05		3
-0. 21914953E-07 0. 94961547E-11 0. 14057907E+05	0. 19225538E+02		4
C4H	C 4H 1 G	300 3000 1000	1
0. 77697592E+01 0. 49829977E-02-0. 17628546E-05	0. 28144284E-09-0. 16689869E-13		2
0. 94345898E+05-0. 14165274E+02 0. 13186295E+01	0. 38582955E-01-0. 71385621E-04		3
0. 65356360E-07 0. 22617666E-10 0. 95456109E+05	0. 15567583E+02		4
C4H2	C 4H 2 G	300 3000 1000	1
0. 86637707E+01 0. 67247190E-02-0. 23593398E-05	0. 37506381E-09-0. 22230940E-13		2
0. 53252273E+05-0. 21093504E+02-0. 39201030E+00	0. 51937565E-01-0. 91737340E-04		3
0. 80471985E-07-0. 26898218E-10 0. 54845266E+05	0. 20957794E+02		4
C6H2	C 6H 2 G	300 3000 1000	1
0. 13226281E+02 0. 73904302E-02-0. 22715381E-05	0. 25875216E-09-0. 55356741E-14		2
0. 80565258E+05-0. 41201176E+02-0. 15932624E+01	0. 80530144E-01-0. 14800650E-03		3
0. 13300031E-06-0. 45332314E-10 0. 83273227E+05	0. 27980873E+02		4
C20	C 20 1 G	300 5000 1000	1
0. 48498092E+01 0. 29475850E-02-0. 10907290E-05	0. 17925619E-09-0. 11157580E-13		2
0. 32820551E+05-0. 64532262E+00 0. 33688509E+01	0. 82418034E-02-0. 87651451E-05		3
0. 55692619E-08-0. 15400090E-11 0. 33170809E+05	0. 67133141E+01		4
C3H2	C 3H 2 G	300 5000 1000	1
0. 65308528E+01 0. 58703162E-02-0. 17207770E-05	0. 21274980E-09-0. 82919096E-14		2
0. 51152141E+05-0. 11227280E+02 0. 26910770E+01	0. 14803660E-01-0. 32505509E-05		3
-0. 86443626E-08 0. 52848780E-11 0. 52190719E+05	0. 87573910E+01		4
C3H3	C 3H 3 G	200 5000 1000	1
0. 71422186E+01 0. 76190201E-02-0. 26745995E-05	0. 42491480E-09-0. 25147541E-13		2
0. 38908742E+05-0. 12584844E+02 0. 13511093E+01	0. 32741122E-01-0. 47382713E-04		3
0. 37630979E-07-0. 11854092E-10 0. 40105777E+05	0. 15205893E+02		4
aC3H4	C 3H 4 G	200 5000 1000	1
0. 63168721E+01 0. 11133728E-01-0. 39629376E-05	0. 63564237E-09-0. 37875539E-13		2
0. 20117494E+05-0. 10995766E+02 0. 26130445E+01	0. 12122575E-01 0. 18539880E-04		3
-0. 34525151E-07 0. 15335079E-10 0. 21541566E+05	0. 10226139E+02		4
pC3H4	C 3H 4 G	200 5000 1000	1
0. 60252399E+01 0. 11336542E-01-0. 40223390E-05	0. 64376066E-09-0. 38299635E-13		2
0. 19620941E+05-0. 86043787E+01 0. 26803868E+01	0. 15799651E-01 0. 25070597E-05		3
-0. 13657623E-07 0. 66154287E-11 0. 20802373E+05	0. 98769350E+01		4
cc3H4	C 3H 4 G	300 5000 1000	1
0. 66999931E+01 0. 10357372E-01-0. 34551167E-05	0. 50652949E-09-0. 26682276E-13		2
0. 30199051E+05-0. 13378770E+02-0. 24621047E-01	0. 23197215E-01-0. 18474357E-05		3
-0. 15927593E-07 0. 86846155E-11 0. 32334137E+05	0. 22729761E+02		4
H2C40	C 4H 20 1 G	300 4000 1000	1
0. 10268880E+02 0. 48961639E-02-0. 48850808E-06	0. 27085659E-09 0. 51070130E-13		2
0. 23469029E+05-0. 28159849E+02 0. 48109708E+01	0. 13139990E-01 0. 98650730E-06		3
-0. 61207199E-08 0. 16400030E-11 0. 25458029E+05	0. 21134241E+01		4
c-C4H5	C 4H 5 G	300 3000 1000	1
0. 67467155E+01 0. 17283000E-01-0. 65168579E-05	0. 98917574E-09-0. 34604908E-13		2

0.32808359E+05-0.12912880E+02-0.26397593E+01	0.41549157E-01-0.21920954E-04	3
-0.46559014E-08 0.61348890E-11 0.35373828E+05	0.35701797E+02	4
C4H4 C 4H 4 G	300 3000 1000	1
0.66507092E+01 0.16129434E-01-0.71938875E-05	0.14981787E-08-0.11864110E-12	2
0.31195992E+05-0.97952118E+01-0.19152479E+01	0.52750878E-01-0.71655944E-04	3
0.55072423E-07-0.17286228E-10 0.32978504E+05	0.31419983E+02	4
n-C4H3 C 4H 3 G	300 3000 1000	1
0.54328279E+01 0.16860981E-01-0.94313109E-05	0.25703895E-08-0.27456309E-12	2
0.61600680E+05-0.15673981E+01-0.31684113E+00	0.46912100E-01-0.68093810E-04	3
0.53179921E-07-0.16523005E-10 0.62476199E+05	0.24622559E+02	4
i-C4H3 C 4H 3 G	300 3000 1000	1
0.90978165E+01 0.92207119E-02-0.33878441E-05	0.49160498E-09-0.14529780E-13	2
0.56600574E+05-0.19802597E+02 0.20830412E+01	0.40834274E-01-0.62159685E-04	3
0.51679358E-07-0.17029184E-10 0.58005129E+05	0.13617462E+02	4
CH2CHO C 2H 30 1 G	300 5000 1000	1
0.59756699E+01 0.81305914E-02-0.27436245E-05	0.40703041E-09-0.21760171E-13	2
0.49032178E+03-0.50320878E+01 0.34090624E+01	0.10738574E-01 0.18914925E-05	3
0.71585831E-08 0.28673851E-11 0.15214766E+04	0.95714531E+01	4
n-C4H5 C 4H 5 G	300 3000 1000	1
0.98501978E+01 0.10779008E-01-0.13672125E-05	0.77200535E-09 0.18366314E-12	2
0.38840301E+05-0.26001846E+02 0.16305321E+00	0.39830137E-01-0.34000128E-04	3
0.15147233E-07-0.24665825E-11 0.41429766E+05	0.23536163E+02	4
i-C4H5 C 4H 5 G	300 3000 1000	1
0.10229092E+02 0.94850138E-02-0.90406445E-07	0.12596100E-08 0.24781468E-12	2
0.34642812E+05-0.28564529E+02-0.19932900E-01	0.38005672E-01-0.27559450E-04	3
0.77835551E-08 0.40209383E-12 0.37496223E+05	0.24394241E+02	4
C4H6-1,3 C 4H 6 G	300 3000 1000	1
0.88673134E+01 0.14918670E-01-0.31548716E-05	0.41841330E-09 0.15761258E-12	2
0.91338516E+04-0.23328171E+02 0.11284465E+00	0.34369022E-01-0.11107392E-04	3
-0.92106660E-08 0.62065179E-11 0.11802270E+05	0.23089996E+02	4
C4H6-1,2 C 4H 6 G	300 3000 1000	1
0.17815571E+02-0.42575020E-02 0.10511850E-04	0.44738440E-08 0.58481377E-12	2
0.12673420E+05-0.69826622E+02 0.10234669E+01	0.34959190E-01-0.22009050E-04	3
0.69422721E-08-0.78791872E-12 0.18117990E+05	0.19750660E+02	4
C4H7 C 4H 7 G	300 3000 1000	1
0.11963392E+02 0.11425305E-01 0.78948909E-06	0.19858872E-08 0.36873645E-12	2
0.16962977E+05-0.37542908E+02 0.28698254E+00	0.36964495E-01-0.86277441E-05	3
-0.15051821E-07 0.89891263E-11 0.20551301E+05	0.24484467E+02	4
C4H8-1 C 4H 8 G	300 5000 1000	1
0.20535841E+01 0.34350507E-01-0.15883197E-04	0.33089662E-08-0.25361045E-12	2
-0.21397231E+04 0.15543201E+02 0.11811380E+01	0.30853380E-01 0.50865247E-05	3
-0.24654888E-07 0.11110193E-10-0.17904004E+04	0.21062469E+02	4
l-C5H6 C 5H 6 G	300 3000 1000	1
0.86914568E+01 0.21268958E-01-0.79818547E-05	0.11795985E-08-0.35253359E-13	2
0.25763865E+05-0.19189083E+02 0.58391756E+00	0.42602919E-01-0.24962495E-04	3
0.25815752E-08 0.23169964E-11 0.28043699E+05	0.22916780E+02	4
l-C5H7 C 5H 7 G	300 3000 1000	1
0.22246480E+01 0.39601296E-01-0.22345617E-04	0.60649676E-08-0.63840047E-12	2
0.22303428E+05 0.14009951E+02-0.40974307E+01	0.61832044E-01-0.48770780E-04	3
0.16696418E-07-0.75334899E-12 0.23683646E+05	0.45148109E+02	4
C5H40H C 5H 50 1 G	200 5000 1000	1
0.13367912E+02 0.15205785E-01-0.54592256E-05	0.88134866E-09-0.52774456E-13	2
0.38411506E+04-0.45920837E+02-0.12822236E+01	0.49041159E-01-0.13688997E-04	3
-0.29133858E-07 0.19006964E-10 0.80087100E+04	0.30798359E+02	4
C5H40 C 5H 40 1 G	300 3000 1000	1
0.47927241E+01 0.29221680E-01-0.15997486E-04	0.42069050E-08-0.42815179E-12	2
0.22849287E+04-0.30131893E+01-0.23915355E+01	0.47363680E-01-0.30728170E-04	3
0.78031555E-08-0.25145730E-12 0.43740151E+04	0.34594337E+02	4
C5H50-2,4 C 5H 50 1 G	300 3000 1000	1
0.85405312E+01 0.22989510E-01-0.95437563E-05	0.17061612E-08-0.97459360E-13	2
0.22263699E+05-0.20818825E+02-0.30777600E+01	0.52581679E-01-0.28856513E-04	3
-0.33885479E-08 0.63361399E-11 0.25510455E+05	0.39591522E+02	4
C5H50-1,3 C 5H 50 1 G	300 3000 1000	1
0.92431440E+01 0.22201257E-01-0.93105946E-05	0.17155222E-08-0.10613969E-12	2
0.15908394E+04-0.24087738E+02-0.29566984E+01	0.55851892E-01-0.37241636E-04	3
0.41624357E-08 0.39272010E-11 0.48573193E+04	0.38676682E+02	4
C5H50H C 5H 60 1 G	300 3000 1000	1
0.34893970E+01 0.38052600E-01-0.21654527E-04	0.59238574E-08-0.62763461E-12	2
-0.82131025E+04 0.71248055E+01-0.50430169E+01	0.71253479E-01-0.70918177E-04	3
0.38680220E-07-0.87888264E-11-0.64167788E+04	0.48617100E+02	4
bi-C5H40 C 5H 40 1 G	300 3000 1000	1
0.10514051E+02 0.16667502E-01-0.61001861E-05	0.81804008E-09-0.88743752E-14	2
0.27501334E+05-0.30678673E+02-0.35879545E+01	0.59943721E-01-0.52969943E-04	3
0.19971461E-07-0.14667430E-11 0.31091709E+05	0.40873169E+02	4
l-C6H4 C 6H 4 G	300 3000 1000	1
0.12715182E+02 0.13839662E-01-0.43765440E-05	0.31541636E-09 0.46619026E-13	2
0.57031148E-05-0.39464600E+02 0.29590225E+00	0.58053318E-01-0.67766756E-04	3
0.43376762E-07-0.11418864E-10 0.60001371E+05	0.22318970E+02	4
c-C6H4 C 6H 4 G	300 3000 1000	1
0.13849209E+02 0.78807920E-02 0.18243836E-05	0.21169166E-08 0.37459977E-12	2
0.47446340E+05-0.50404953E+02-0.30991268E+01	0.54030564E-01-0.40839004E-04	3
0.10738837E-07 0.98078490E-12 0.52205711E+05	0.37415207E+02	4
C6H3 C 6H 3 G	300 3000 1000	1

0. 58188343E+01 0. 27933408E-01-0. 17825427E-04 0. 53702536E-08-0. 61707627E-12 2
 0. 85188250E+05-0. 92147827E+00 0. 11790619E+01 0. 55547360E-01-0. 73076168E-04 3
 0. 52076736E-07-0. 15046964E-10 0. 85647312E+05 0. 19179199E+02 4
 C6H6 C 6H 6 G 300 3000 1000 1
 0. 17246994E+02 0. 38420164E-02 0. 82776232E-05-0. 48961120E-08 0. 76064545E-12 2
 0. 26646055E+04-0. 71945175E+02-0. 48998680E+01 0. 59806932E-01-0. 36710087E-04 3
 0. 32740399E-08 0. 37600886E-11 0. 91824570E+04 0. 44095642E+02 4
 C6H5 C 6H 5 G 300 3000 1000 1
 0. 14493439E+02 0. 75712688E-02 0. 37894542E-05-0. 30769500E-08 0. 51347820E-12 2
 0. 33189977E+05-0. 54288940E+02-0. 49076147E+01 0. 59790771E-01-0. 45639827E-04 3
 0. 14964993E-07-0. 91767826E-12 0. 38733410E+05 0. 46567780E+02 4
 C6H5CH3 C 7H 8 G 200 5000 1000 1
 0. 12940034E+02 0. 26691288E-01-0. 96838503E-05 0. 15738629E-08-0. 94663603E-13 2
 -0. 69764911E+03-0. 46728786E+02 0. 16152663E+01 0. 21099439E-01 0. 85366017E-04 3
 -0. 13261067E-06 0. 55956604E-10 0. 40756299E+04 0. 20282209E+02 4
 C6H5CH2 C 7H 7 G 200 5000 1000 1
 0. 14043980E+02 0. 23493873E-01-0. 85375368E-05 0. 13890841E-08-0. 83614417E-13 2
 0. 18564203E+05-0. 51665588E+02 0. 48111540E+00 0. 38512833E-01 0. 32861491E-04 3
 -0. 76972718E-07 0. 35423067E-10 0. 23307027E+05 0. 23548820E+02 4
 bi -C6H5CH2 C 14H 14 G 300 3000 1000 1
 0. 72920351E+01 0. 92501998E-01-0. 51686409E-04 0. 13627090E-07-0. 13811480E-11 2
 0. 10316730E+05-0. 11327380E+02-0. 13889580E+02 0. 17209840E+00-0. 17006601E-03 3
 0. 96018880E-07-0. 23732530E-10 0. 15032340E+05 0. 92707359E+02 4
 C6H5CH2OH C 7H 80 1 G 200 5000 1000 1
 0. 15281154E+02 0. 27208501E-01-0. 98584660E-05 0. 16012183E-08-0. 96278054E-13 2
 -0. 19700471E+05-0. 59418674E+02 0. 20642021E+01 0. 22775140E-01 0. 95972056E-04 3
 -0. 15085109E-06 0. 64175831E-10-0. 14285021E+05 0. 18148312E+02 4
 C6H5CHO C 7H 60 1 G 298 5000 1000 1
 0. 13650737E+02 0. 25680419E-01-0. 10466729E-04 0. 19413431E-08-0. 13483791E-12 2
 -0. 11019744E+05-0. 47965797E+02-0. 31627333E+01 0. 66369243E-01-0. 38416352E-04 3
 -0. 62999379E-08 0. 85807099E-11-0. 61169351E+04 0. 40231735E+02 4
 C6H5CO C 7H 50 1 G 300 2500 1000 1
 0. 13374409E+02 0. 23999289E-01-0. 10465724E-04 0. 21669131E-08-0. 18007045E-12 2
 0. 69147837E+04-0. 44659218E+02-0. 20251155E+01 0. 61512541E-01-0. 31603653E-04 3
 -0. 69724599E-08 0. 79835149E-11 0. 11255803E+05 0. 35778175E+02 4
 C6H5C2H3 C 8H 8 G 298 5000 1000 1
 0. 16139277E+02 0. 24210848E-01-0. 72678358E-05 0. 11392276E-08-0. 72984879E-13 2
 0. 10249251E+05-0. 61169437E+02-0. 10717708E+02 0. 12666725E+00-0. 17762493E-03 3
 0. 14344049E-06-0. 47616577E-10 0. 16597133E+05 0. 71526329E+02 4
 C6H5C2H5 C 8H 10 G 300 3000 1000 1
 0. 38789780E+01 0. 58100589E-01-0. 31963798E-04 0. 84489926E-08-0. 86948249E-12 2
 -0. 50249219E+03 0. 38370991E+01-0. 72668452E+01 0. 10030890E+00-0. 96517149E-04 3
 0. 55659079E-07-0. 14533700E-10 0. 19872900E+04 0. 58577461E+02 4
 HOC6H4CH3 C 7H 80 1 G 200 5000 1000 1
 0. 15932987E+02 0. 27011160E-01-0. 99448725E-05 0. 16296690E-08-0. 98513300E-13 2
 -0. 23592064E+05-0. 59732841E+02 0. 42258266E+00 0. 45551635E-01 0. 32012515E-04 3
 -0. 81121961E-07 0. 37665659E-10-0. 18202621E+05 0. 26032904E+02 4
 OC6H4CH3 C 7H 70 1 G 300 2500 1000 1
 0. 22609371E+02 0. 75646150E-02 0. 65960894E-05-0. 47150865E-08 0. 80409063E-12 2
 -0. 82025244E+04-0. 97292511E+02-0. 28855777E+00 0. 48003536E-01 0. 18032993E-04 3
 0. 61741488E-07 0. 28852587E-10-0. 68945581E+03 0. 26720068E+02 4
 C6H4O2 C 6H 40 2 G 300 5000 1000 1
 0. 11730840E+02 0. 23614995E-01-0. 10234576E-04 0. 19532174E-08-0. 12746022E-12 2
 -0. 21085770E+05-0. 36300453E+02-0. 95193005E+00 0. 57842445E-01-0. 38214439E-04 3
 0. 46312656E-08 0. 36296651E-11-0. 17611047E+05 0. 29239513E+02 4
 C5H5 C 5H 5 G 300 3000 1000 1
 0. 79035592E+01 0. 19480145E-01-0. 80105856E-05 0. 14526126E-08-0. 88419167E-13 2
 0. 27293488E+05-0. 16680317E+02-0. 37336805E+01 0. 54409105E-01-0. 42838048E-04 3
 0. 11825469E-07 0. 10744666E-11 0. 30249613E+05 0. 42443283E+02 4
 C5H6 C 5H 6 G 298 5000 1000 1
 0. 10624320E+02 0. 17735448E-01-0. 62330446E-05 0. 97308317E-09-0. 55500130E-13 2
 0. 10772188E+05-0. 35773422E+02-0. 28978958E+01 0. 43484777E-01-0. 33511005E-05 3
 -0. 31103756E-07 0. 16912444E-10 0. 15084742E+05 0. 36894760E+02 4
 C6H5O C 6H 50 1 G 300 5000 1000 1
 0. 13833984E+02 0. 17618403E-01-0. 60696257E-05 0. 91988173E-09-0. 50449181E-13 2
 -0. 69212549E+03-0. 50392990E+02-0. 18219433E+01 0. 48122510E-01-0. 46792302E-05 3
 -0. 34018594E-07 0. 18649637E-10 0. 42429180E+04 0. 33526199E+02 4
 C6H5OH C 6H 60 1 G 300 5000 1000 1
 0. 14912073E+02 0. 18378135E-01-0. 61983128E-05 0. 91983221E-09-0. 49209565E-13 2
 -0. 18375199E+05-0. 55924103E+02-0. 16956539E+01 0. 52271299E-01-0. 72024050E-05 3
 -0. 35859603E-07 0. 20449073E-10-0. 13284121E+05 0. 32542160E+02 4
 P2 C 12H 10 G 300 3000 1000 1
 0. 50761871E+02-0. 34501564E-01 0. 50293413E-04-0. 21559579E-07 0. 30097192E-11 2
 0. 21538867E+04-0. 24670712E+03-0. 10283234E+02 0. 12428707E+00-0. 95990268E-04 3
 0. 32294793E-07-0. 23045229E-11 0. 20165258E+05 0. 72707947E+02 4
 END

4. Cuplikan Output Program Perhitungan *Ignition Delay Time*

```
*****
*                               CHEMKIN Collection Release 3.7                               *
*                               AURORA Application                                       *
*                               PERFECTLY STIRRED REACTOR MODEL                         *
* Copyright 1997-2002 Reaction Design. All Rights Reserved. *
*****
```

	WORKING SPACE PROVIDED	REQUIREMENTS REQUIRED
LOGICAL	314	314
INTEGER	50404	50404
REAL	992197	992197
CHARACTER	293	293

Initializing CHEMKIN Gas-phase Library, a component of CHEMKIN Release 3.7.
This and All Other CHEMKIN Libraries are Copyright (C) 1997-2002 Reaction Design.

KEYWORD INPUT

```
CONV
TEMP 1051.630
REAC C6H5CH3 0.00962
REAC O2 0.08658
REAC AR 0.9038
PRES 45.0
TIME 3.00E-2
DELT 1.E-3
DTSV 1.E-3
END
```

WARNING... HEAT LOSS NEEDS TO BE SPECIFIED FOR "ENRG" PROBLEMS,
A HEAT LOSS OF 0.0 IS ASSUMED.

KINETICS MECHANISM:

```
Total number of gas phase species = 93
Total number of gas phase reactions = 617
Total number of surface materials = 1
```

Material: MATERIAL1

```
Total number of surface phase species = 0
Total number of surface phases = 0
Total number of bulk phase species = 0
Total number of bulk phases = 0
Total number of surface phase reactions = 0
```

=====
PSPRINT: Printing of current solution from DDASPK:
=====

DDASPK Transient Solution at Time = 0.0000E+00 seconds

CHARACTERISTIC TIME	0.0000E+00	SEC
MASS FLOW RATE	0.0000E+00	GM/SEC
PRESSURE	45.00	ATM
MASS DENSITY	0.3956E-01	GM/CM3
VOLUME	1.000	CM3
TOTAL MASS	0.3956E-01	G
SURFACE AREA	0.0000E+00	CM2
SURFACE TO VOLUME RATIO	0.0000E+00	CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION	-5.6145E+01	CAL/S/CM3
TEMPERATURE	1052.	K
SURF TEMP, MATERIAL1	1051.6300	K (same as gas temp)
HEAT LOSS, MATERIAL1	0.0000E+00	CAL/SEC

=====
PSPRINT: Printing of current solution from DDASPK:
=====

=====

DDASPK Transient Solution at Time = 3.0000E-02 seconds

CHARACTERISTIC TIME	0.0000E+00	SEC
MASS FLOW RATE	0.0000E+00	GM/SEC
PRESSURE	128.6	ATM
MASS DENSITY	0.3957E-01	GM/CM3
VOLUME	1.000	CM3
TOTAL MASS	0.3956E-01	G
SURFACE AREA	0.0000E+00	CM2
SURFACE TO VOLUME RATIO	0.0000E+00	CM-1
GAS CHEM HEAT PRODUCTION	6.0612E-01	CAL/S/CM3
TEMPERATURE	2949.	K
SURF TEMP, MATERIAL1	2948.5828	K (same as gas temp)
HEAT LOSS, MATERIAL1	0.0000E+00	CAL/SEC

REACTOR GAS PHASE MOLE FRACTIONS

Time (s)	Temp. (K)	Mole fraction O2	Mole_fraction H2O	Mole_fraction CO	Mole_fraction CO2	Mole_fraction_C6H5CH3
0	1051.63	0.0866	0.0000	0.0000	0.0000	0.0096
0.001	1057.69	0.0863	0.0003	0.0000	0.0000	0.0091
0.002	1065.95	0.0859	0.0007	0.0001	0.0000	0.0086
0.003	1076.46	0.0853	0.0011	0.0003	0.0000	0.0080
0.004	1089.91	0.0847	0.0016	0.0006	0.0000	0.0074
0.005	1107.61	0.0837	0.0023	0.0011	0.0000	0.0067
0.006	1132.45	0.0824	0.0031	0.0019	0.0001	0.0060
0.007	1172.77	0.0802	0.0044	0.0034	0.0002	0.0052
0.008	1279.88	0.0744	0.0079	0.0079	0.0007	0.0035
0.009	2937.96	0.0080	0.0339	0.0133	0.0513	0.0000
0.01	2938.68	0.0080	0.0339	0.0134	0.0513	0.0000
0.011	2939.37	0.0079	0.0339	0.0135	0.0513	0.0000
0.012	2940.04	0.0079	0.0339	0.0135	0.0513	0.0000
0.013	2940.69	0.0079	0.0339	0.0136	0.0513	0.0000
0.014	2941.31	0.0078	0.0339	0.0136	0.0512	0.0000
0.015	2941.91	0.0078	0.0340	0.0137	0.0512	0.0000
0.016	2942.48	0.0078	0.0340	0.0137	0.0512	0.0000
0.017	2943.04	0.0077	0.0340	0.0138	0.0512	0.0000

=====

THERMAL IGNITION INFORMATION:

Thermal ignition time	=	0.810E-02 sec
Thermal ignition temperature	=	0.145E+04 K

=====

Total CPUtime: 13 (seconds)

5. Cuplikan Output Program Perhitungan Konsentrasi Spesi Kondisi Tunak Pada Reactor PSR.

```
*****
*                               CHEMKIN Collection Release 3.7                               *
*                               AURORA Application                                       *
*                               PERFECTLY STIRRED REACTOR MODEL                         *
* Copyright 1997-2002 Reaction Design. All Rights Reserved. *
*****
```

	WORKING SPACE REQUIREMENTS	
	PROVIDED	REQUIRED
LOGICAL	314	314
INTEGER	50404	50404
REAL	992197	992197
CHARACTER	293	293

Initializing CHEMKIN Gas-phase Library, a component of CHEMKIN Release 3.7.
This and All Other CHEMKIN Libraries are Copyright (C) 1997-2002 Reaction Design.

KEYWORD INPUT

```
! This is a steady-state combustion problem
! The conditions are for an adiabatic PSR with H2/air
! steady-state
STST
! solve the energy equation
ENRG
! composition of the fuel
REAC 02 0.1732
REAC C6H5CH3 0.00962
REAC AR 0.8172
! identify equilibrium products to help determine
! the initial guesses of the species fractions
! pressure in atmospheres
PRES 25.0
! volume in cm3
VOL 100
! residence time in seconds
TAU 5.0E-2
! temperature of the inlet gases
TINL 1000.0
! rate of heat loss to the environment in cal/mole
QLOS 0.0
! printing level (higher is more printing)
PRNT 1
! initial time-step size for time-steps that aid
! the steady-state solution
! TIM1 is for the fixed-temperature iteration
! TIM2 is for when the energy equation is being solved
TIM1 50 1.E-6
TIM2 50 1.E-6
! initial estimate of the gas temperature in the reactor
TEMP 1045
! lower bounds for the species fractions during iterations
SFLR -1.E-10
! solve another problem after this one
CNTN
AROP
END
CAUTION... REACTANT MOLE FRACTIONS SUM TO 1.00002000000000
Calling SUBROUTINE EQUIL
```

	WORKING SPACE REQUIREMENTS	
	PROVIDED	REQUIRED
INTEGER	28205	28205
REAL	143182	143182
CHAR	93	93

FIRST SOLUTION ESTIMATE IS EQUILIBRIUM

```

=====
KINETICS MECHANISM:
Total number of gas phase species = 93
Total number of gas phase reactions = 617
Total number of surface materials = 1

Material: MATERIAL1
Total number of surface phase species = 0
Total number of surface phases = 0
Total number of bulk phase species = 0
Total number of bulk phases = 0
Total number of surface phase reactions = 0
=====

```

```

=====
REACTOR # 1 INLET CONDITIONS:
Residence time in reactor = 0.500E-01 sec
(which, based on an estimated reactor density = 0.207E-01
gm/cm**3
and on a reactor volume = 100. cm**3,
produces an estimated inlet mass flow rate) = 41.4 gm/sec

Inlet temperature = 1000.0 Kelvin
Inlet pressure (assumed equal to reactor pressure) = 25.0 atm
Inlet density = 0.21850E-01 gm/cm**3
Inlet mean molecular weight = 71.718 gm/mole
Inlet molar flow rate = 0.57753 moles/sec
Inlet volumetric flow rate = 1895.6 cm**3/sec
(based on reactor pressure and inlet temperature)
= 0.84778E+06 SCCM
= 847.78 SLPM

```

NORMALIZED AND ABSOLUTE RATE-OF-PRODUCTION COEFFICIENTS
(surface reactions are normalized by the surface area to volume ratio)
Threshold normalized value for printing of ROP coefficients = 0.100E-01

Gas Phase Species	4.02		NORMALIZED (MOLES/CC-SEC)
Gas Phase Reaction 1.		H+O2<=>O+OH	-0.453 (-1.5791E-04)
Gas Phase Reaction 12.		H+O2+M<=>HO2+M	-0.039 (-1.3414E-05)
Gas Phase Reaction 14.		H+O2+H2O<=>HO2+H2O	-0.179 (-6.2387E-05)
Gas Phase Reaction 16.		H+O2+AR<=>HO2+AR	-0.122 (-4.2388E-05)
Gas Phase Reaction 21.		HO2+O<=>OH+O2	0.076 (9.7928E-06)
Gas Phase Reaction 22.		HO2+OH<=>O2+H2O	0.916 (1.1734E-04)
Gas Phase Reaction 51.		HCO+O2<=>CO+HO2	-0.017 (-5.9758E-06)
Gas Phase Reaction 55.		CH2+O2<=>HCO+OH	-0.012 (-4.1666E-06)
Gas Phase Reaction 139.		C2H+O2<=>HCO+CO	-0.015 (-5.1667E-06)
Gas Phase Reaction 144.		C2O+O2<=>2CO+O	-0.023 (-8.0116E-06)
Gas Phase Reaction 147.		HCCO+O2<=>OH+2CO	-0.027 (-9.3002E-06)
Gas Phase Reaction 260.		C3H2+O2<=>HCCO+H+CO	-0.017 (-5.8115E-06)
Gas Phase Reaction 550.		C6H5+O2<=>C6H5O+O	-0.038 (-1.3202E-05)
Gas Phase Reaction 551.		C6H5+O2<=>C6H4O2+H	-0.024 (-8.4267E-06)
Total Rate-of-production (moles/cc-sec) = 1.2813E-04			
Total Rate-of-consumption (moles/cc-sec) = 3.4822E-04			
Net Rate-of-production (moles/cc-sec) = -2.2009E-04			

Gas Phase Species 81. C6H5CH3		NORMALIZED (MOLES/CC-SEC)	
Gas Phase Reaction 502.	C6H5CH3<=>C6H5+CH3	-0.094	(-2.3054E-06)
Gas Phase Reaction 504.	C6H5CH3+OH<=>C6H5CH2+H2O	-0.020	(-4.8982E-07)
Gas Phase Reaction 510.	C6H5CH2+H<=>C6H5CH3	-0.874	(-2.1395E-05)
Gas Phase Reaction 529.	C6H5CHO+C6H5CH2<=>C6H5CO+C6H5CH3	1.000	(1.0489E-11)
Total Rate-of-production (moles/cc-sec) = 1.0490E-11			
Total Rate-of-consumption (moles/cc-sec) = 2.4472E-05			
Net Rate-of-production (moles/cc-sec) = -2.4472E-05			

Gas Phase Species 8. H2O		NORMALIZED (MOLES/CC-SEC)	
Gas Phase Reaction 4.	2OH<=>O+H2O	-0.994	(-8.6699E-05)
Gas Phase Reaction 9.	H+OH+M<=>H2O+M	0.024	(4.4817E-06)
Gas Phase Reaction 22.	HO2+OH<=>O2+H2O	0.639	(1.1734E-04)
Gas Phase Reaction 29.	H2O2+OH<=>HO2+H2O	0.027	(4.9116E-06)
Gas Phase Reaction 82.	CH2O+OH<=>HCO+H2O	0.019	(3.5527E-06)
Gas Phase Reaction 151.	HCCO+OH<=>C2O+H2O	0.027	(5.0117E-06)
Gas Phase Reaction 159.	C2H2+OH<=>C2H+H2O	0.016	(2.9713E-06)
Gas Phase Reaction 270.	C3H3+OH<=>C3H2+H2O	0.046	(8.5017E-06)
Gas Phase Reaction 403.	C4H2+OH<=>C4H+H2O	0.014	(2.5476E-06)
Gas Phase Reaction 423.	C4H4+OH<=>n-C4H3+H2O	0.021	(3.8957E-06)
Gas Phase Reaction 424.	C4H4+OH<=>i-C4H3+H2O	0.023	(4.1558E-06)
Gas Phase Reaction 525.	C6H5CHO+OH<=>C6H5CO+H2O	0.111	(2.0450E-05)
Total Rate-of-production (moles/cc-sec) = 1.8357E-04			
Total Rate-of-consumption (moles/cc-sec) = 8.7200E-05			
Net Rate-of-production (moles/cc-sec) = 9.6366E-05			

Gas Phase Species 12. CO		NORMALIZED (MOLES/CC-SEC)	
Gas Phase Reaction 30.	CO+O+M<=>CO2+M	-0.052	(-8.7382E-06)
Gas Phase Reaction 31.	CO+OH<=>CO2+H	-0.931	(-1.5662E-04)
Gas Phase Reaction 34.	CO+HO2<=>CO2+OH	0.011	(-1.8342E-06)
Gas Phase Reaction 50.	HCO+M<=>CO+H+M	0.157	(2.6727E-05)
Gas Phase Reaction 51.	HCO+O2<=>CO+HO2	0.035	(5.9758E-06)
Gas Phase Reaction 61.	CH2+CO(+M)<=>CH2CO(+M)	0.026	(4.4652E-06)
Gas Phase Reaction 139.	C2H+O2<=>HCO+CO	0.030	(5.1667E-06)
Gas Phase Reaction 144.	C2O+O2<=>2CO+O	0.094	(1.6023E-05)
Gas Phase Reaction 146.	HCCO+O<=>H+2CO	0.042	(7.0692E-06)
Gas Phase Reaction 147.	HCCO+O2<=>OH+2CO	0.109	(1.8600E-05)
Gas Phase Reaction 260.	C3H2+O2<=>HCCO+H+CO	0.034	(5.8115E-06)
Gas Phase Reaction 401.	C4H2+O<=>C3H2+CO	0.011	(1.9542E-06)
Gas Phase Reaction 541.	C6H5CO<=>C6H5+CO	0.129	(2.1938E-05)
Gas Phase Reaction 557.	C6H4O2<=>C5H4O+CO	0.065	(1.0991E-05)
Gas Phase Reaction 558.	C6H4O2+H<=>CO+C5H5O-1,3	0.011	(1.8992E-06)
Gas Phase Reaction 559.	C6H4O2+O<=>2CO+C2H2+CH2CO	0.028	(4.7458E-06)
Gas Phase Reaction 560.	C6H5O<=>CO+C5H5	0.045	(7.7209E-06)
Gas Phase Reaction 603.	C5H4O<=>C4H4+CO	0.030	(5.0994E-06)
Gas Phase Reaction 605.	C5H4O+H<=>CO+c-C4H5	0.010	(1.7460E-06)
Gas Phase Reaction 606.	C5H4O+O<=>CO+HCO+C3H3	0.072	(1.2235E-05)
Total Rate-of-production (moles/cc-sec) = 1.7030E-04			
Total Rate-of-consumption (moles/cc-sec) = 1.6829E-04			
Net Rate-of-production (moles/cc-sec) = 2.0063E-06			

```

Gas Phase Species 13. CO2
                                NORMALIZED (MOLES/CC-SEC)
Gas Phase Reaction 30.          CO+O+M<=>CO2+M          0.051 (8.7382E-06)
Gas Phase Reaction 31.          CO+OH<=>CO2+H           0.923 (1.5662E-04)
Gas Phase Reaction 34.          CO+HO2<=>CO2+OH          0.011 (1.8342E-06)
Gas Phase Reaction 44.          CH+CO2<=>HCO+CO         -0.244 (-1.1213E-07)
Gas Phase Reaction 77.          CH2*+CO2<=>CH2O+CO        -0.756 (-3.4672E-07)
Total Rate-of-production (moles/cc-sec) = 1.6976E-04
Total Rate-of-consumption (moles/cc-sec) = 4.5885E-07
Net Rate-of-production (moles/cc-sec) = 1.6930E-04

```

```

Gas Phase Species 79. C6H6
                                NORMALIZED (MOLES/CC-SEC)
Gas Phase Reaction 283.          2C3H3<=>C6H6          -0.959 (-3.3195E-07)
Gas Phase Reaction 527.          C6H5CHO+H<=>C6H6+HCO  0.157 (5.4472E-08)
Gas Phase Reaction 536.          OC6H4CH3<=>C6H6+H+CO  0.495 (1.7115E-07)
Gas Phase Reaction 542.          C6H5+H(+M)<=>C6H6(+M) 0.095 (3.2904E-08)
Gas Phase Reaction 544.          C6H6+OH<=>C6H5+H2O   0.234 (8.0966E-08)
Gas Phase Reaction 564.          C6H6+OH<=>C6H5OH+H   -0.014 (-4.6883E-09)
Total Rate-of-production (moles/cc-sec) = 3.4603E-07
Total Rate-of-consumption (moles/cc-sec) = 3.4599E-07
Net Rate-of-production (moles/cc-sec) = 3.7718E-11

```

6. Cuplikan Output Program *Plug Flow Reactor*

```

*****
*                               CHEMKIN Collection Release 3.7          *
*                               PLUG Application                        *
*                               PLUG FLOW REACTOR MODEL                *
* Copyright 1997-2002 Reaction Design. All Rights Reserved. *
*****

```

```

                                WORKING SPACE REQUIREMENTS
                                PROVIDED      REQUIRED
INTEGER                          19901        19901
REAL                              23682        23682
CHARACTER                          193         193

```

Initializing CHEMKIN Gas-phase Library, a component of CHEMKIN Release 3.7.
This and All Other CHEMKIN Libraries are Copyright (C) 1997-2002 Reaction Design.

Initializing SURFACE CHEMKIN Library, a component of CHEMKIN Release 3.7.

```

XEND 5.09
DX 0.01
ADIA
MOLE
TEMP 1200.0
PRES 1.0
VEL 0.250
DIAM 5.0
REAC 02 0.13744
REAC C6H5CH3 0.00962
REAC AR 0.85294
VIS 6.705-04
END

```

X = 1.000E-02 CM
 RESIDENCE TIME = 2.370E-02 S
 TEMPERATURE = 2450.5 K
 GAS DENSITY = 3.593E-04 G/CM**3
 NET PRODUCTION OF HEAT DUE TO GAS CHEMISTRY = 8.438E-06 CAL/S/CM**3
 PRESSURE = 7.600E+02 TORR
 VELOCITY = 5.189E-01 CM/S
 AREA = 1.963E+01 CM**2
 DADX = 0.000E+00 CM
 GAS-PHASE MOLE FRACTIONS

H	= 5.277E-04	H2	= 6.859E-04	O	= 2.593E-03
O2	= 5.278E-02	N2	= 0.000E+00	AR	= 8.391E-01
OH	= 5.083E-03	H2O	= 3.385E-02	HO2	= 2.597E-06
H2O2	= 4.950E-08	C	= 6.152E-16	CO	= 7.123E-03
CO2	= 5.810E-02	CH	= 1.464E-14	CH2	= 7.778E-14
CH2*	= 9.824E-15	CH3	= 4.949E-13	CH4	= 3.558E-14
CH3O	= 4.483E-16	CH2OH	= 1.518E-15	C2H	= 1.610E-14
C2H2	= 5.741E-13	C2H3	= 6.475E-16	C2H4	= 2.830E-16
C2H5	= 1.477E-21	C2H6	= 8.057E-24	C2O	= 6.145E-14
HCCO	= 2.850E-13	H2CC	= 3.550E-15	HCCOH	= 6.660E-14
CH2CO	= 2.625E-13	CH2CHO	= 2.361E-16	CH3CHO	= 7.585E-21
CH3CO	= 3.634E-19	C3H2	= 1.459E-13	C3H3	= 6.575E-14
pC3H4	= 1.900E-16	aC3H4	= 7.953E-17	cC3H4	= 8.993E-19
CH3CHCH	= 3.648E-23	CH3CCH2	= 1.034E-21	aC3H5	= 8.646E-21
C3H6	= 2.761E-23	n-C3H7	= 3.395E-28	i-C3H7	= 2.463E-28
C3H8	= 2.724E-30	C2H3CHO	= 7.503E-22	C4H	= 1.273E-14
C4H2	= 1.040E-12	n-C4H3	= 2.569E-14	i-C4H3	= 4.499E-14
C4H4	= 9.743E-14	i-C4H5	= 1.542E-16	n-C4H5	= 7.339E-15
c-C4H5	= 1.019E-15	C4H6-1,2	= 5.423E-17	C4H6-1,3	= 1.883E-16
C4H7	= 1.217E-21	C4H8-1	= 4.502E-24	H2C4O	= 7.916E-14
I-C5H6	= 4.396E-17	I-C5H7	= 3.918E-21	C5H5	= 5.376E-13
C5H6	= 1.138E-16	C5H4O	= 1.641E-13	bi-C5H4O	= 4.279E-18
C5H4OH	= 3.247E-17	C5H5OH	= 1.670E-16	C5H5O-1,3	= 2.878E-17
C5H5O-2,4	= 4.922E-21	C6H2	= 3.086E-14	C6H3	= 4.774E-18
I-C6H4	= 2.468E-15	c-C6H4	= 1.105E-15	C6H5	= 1.181E-13
C6H6	= -2.723E-15	C6H5CH2	= 1.536E-13	C6H5CH3	= 5.926E-16
C6H5CHO	= 1.359E-12	C6H5CO	= 8.702E-19	bi-C6H5CH2	= 4.289E-29
C6H5CH2OH	= 5.748E-18	C6H5O	= 2.253E-14	C6H5OH	= 2.417E-16
C6H4O2	= 4.247E-14	OC6H4CH3	= 2.454E-18	HOC6H4CH3	= 3.320E-18
C6H5C2H5	= 1.247E-15	C6H5C2H3	= 1.276E-04	p2	= -2.998E-20