

BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

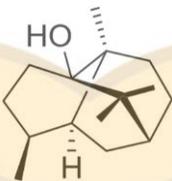
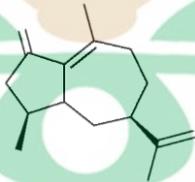
www.itk.ac.id

Pada pengantar bab ini merupakan deskripsi singkat dari isi bab 2 Kajian Pustaka dan Dasar Teori. Isi bab 2 Pendahuluan meliputi : Definisi Minyak Nilam, Kesetimbangan Uap Cair, Metode Group-contribution (UNIFAC) dalam Estimasi Koefisien Aktivitas, Metode COSMO-SAC dalam Estimasi Koefisien Aktivitas, Estimasi Tekanan Uap, Model Panas Penguapan, dan Multicomponent Distillation.

2.1 Minyak Nilam

Minyak nilam berwarna kuning jernih dan berbau khas, mengandung senyawa *patchouli alcohol* yang merupakan penyusun utama dalam minyak nilam, dan kadarnya mencapai 20-40% (van Beek dkk, 2018). Patchouli alcohol merupakan senyawa seskiterpen alkohol tersier trisiklik, tidak larut dalam air, larut dalam alkohol, eter atau pelarut organik yang lain, mempunyai titik didih 288°C dan kristal yang terbentuk memiliki titik leleh 56°C. Minyak nilam selain mengandung senyawa *patchouli alcohol* (komponen utama) juga mengandung komponen lainnya, yaitu senyawa terpen, epoksida, dan keton (Dantas dkk, 2020). Adapun beberapa senyawa yang terdapat dalam minyak nilam ditunjukkan oleh tabel 2.1.

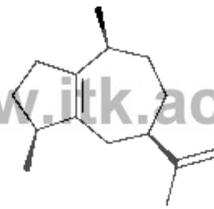
Tabel 2.1 Senyawa Penyusun Minyak Nilam

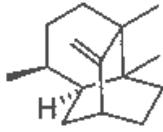
No	Nama Senyawa	Gambar Struktur	Struktur Kimia	Berat Molekul
1	Patchoulol		$C_{16}H_{26}O$	222
2	α -Bulnesene		$C_{15}H_{24}$	204
3	α -Guaiene		$C_{15}H_{24}$	204

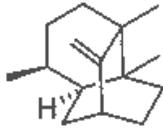
www.itk.ac.id

No	Nama Senyawa	Gambar Struktur	Struktur Kimia	Berat Molekul
----	--------------	-----------------	----------------	---------------

www.itk.ac.id

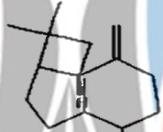


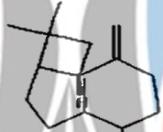
4	Seychellene		$C_{15}H_{24}$	204
---	-------------	---	----------------	-----



5	α -Patchoulene		$C_{15}H_{24}$	204
---	-----------------------	---	----------------	-----

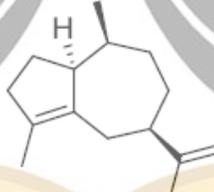


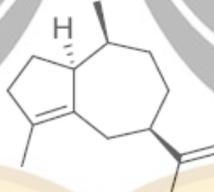
6	(E)- β -Caryophyllene		$C_{15}H_{24}$	204
---	-----------------------------	---	----------------	-----

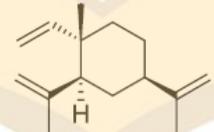


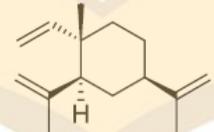
7	β -Patchoulene		$C_{15}H_{24}$	204
---	----------------------	---	----------------	-----



8	Aciphyllene		$C_{15}H_{24}$	204
---	-------------	---	----------------	-----



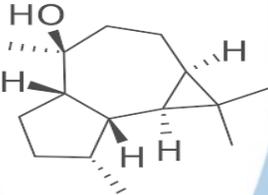
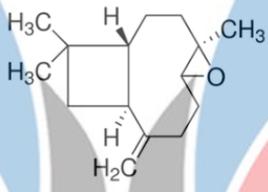
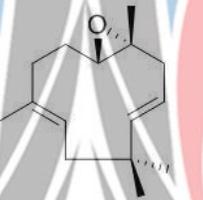
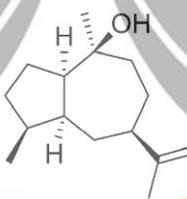
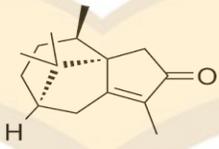
9	β -Elemene		$C_{15}H_{24}$	204
---	------------------	---	----------------	-----



10	α -Humulene		$C_{15}H_{24}$	204
----	--------------------	---	----------------	-----



www.itk.ac.id

No	Nama Senyawa	Gambar Struktur	Struktur Kimia	Berat Molekul
11.	γ -Patchoulene		$C_{15}H_{24}$	204
12	Viridiflorol		$C_{15}H_{26}O$	222
13	Caryophyllene Oxide		$C_{15}H_{24}O$	220
14	Humulene Epoxide ii		$C_{15}H_{24}O$	220
15	Pogostol		$C_{15}H_{26}O$	222
16	Cyperotundone		$C_{15}H_{22}O$	218

(van Beek dkk, 2018)

2.2 Keseimbangan Uap Cair

Keseimbangan uap cair merupakan kondisi operasi dimana fase cair dan uap sistem terbentuk. Pemodelan keseimbangan uap cair antara lain hukum *Raoult*, hukum *Raoult* modifikasi, dan hukum *Henry*. Persamaan umum keseimbangan uap cair adalah sebagai berikut (Smith dkk, 2001).

$$y_i \phi_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (2.1)$$

Nilai y_i merupakan fraksi komponen i pada fase uap, nilai ϕ_i merupakan fugasitas komponen i . P merupakan tekanan sistem. Nilai x_i merupakan fraksi komponen i pada fase cair. Nilai γ_i merupakan koefisien aktivitas komponen i . Nilai P_i^{sat} merupakan tekanan uap jenuh atau *saturated* komponen murni i . Fugasitas dan koefisien aktivitas merupakan koefisien yang menunjukkan ketidakidealan berturut-turut fase uap dan fase cair (Smith dkk, 2001).

Pada tekanan rendah sampai tekanan atmosfer, fase uap dapat dianggap sebagai gas ideal, maka fugasitas dapat diabaikan, sehingga persamaan 2.1 menjadi seperti berikut (Smith dkk, 2001).

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (2.2)$$

Persamaan 2.2 merupakan persamaan *Raoult* modifikasi. Jika sistem merupakan campuran dari senyawa sejenis atau memiliki gugus yang sama maka fase cair dianggap sebagai larutan ideal sehingga koefisien aktivitas dapat diabaikan. Sehingga persamaan 2.2 berubah menjadi seperti berikut (Smith dkk, 2001).

$$y_i P = x_i P_i^{sat} \quad (2.3)$$

Persamaan 2.3 merupakan persamaan *Raoult*. Jika temperatur kritis dari suatu komponen atau senyawa jauh di bawah temperatur sistem, maka hukum *Raoult* menjadi tidak berlaku. Temperatur kritis merupakan suhu dimana fase uap dan cair tidak lagi dapat dibedakan berdasarkan diagram fasenya. Maka kesetimbangan uap cairnya dimodelkan berdasarkan hukum *Henry*.

$$y_i P = x_i H_i \quad (2.4)$$

Nilai H_i merupakan konstanta *Henry* untuk komponen i . (Smith dkk, 2001)

2.3 Metode Group-contribution (UNIFAC) dalam Estimasi Koefisien Aktivitas

Metode *Group-contribution* adalah teknik untuk memperkirakan dan memprediksi sifat termodinamika dan lainnya berdasarkan struktur molekul. Metode

prediksi dapat menggantikan pengukuran eksperimental jika memberikan estimasi yang cukup baik. Properti yang diperkirakan tidak dapat seakurat pengukuran eksperimental yang baik, tetapi untuk banyak tujuan kualitas properti yang diperkirakan cukup. Metode prediksi juga dapat digunakan untuk memvalidasi hasil eksperimental (Skjold-Jorgensen dkk, 1979).

Metode *Group-contribution* menggunakan prinsip bahwa beberapa aspek sederhana dari struktur komponen kimia selalu sama di banyak molekul berbeda. Konstituen umum terkecil adalah atom dan ikatan. Unsur komponen yang sedikit lebih kompleks berikutnya adalah kelompok fungsional, yang sendiri dibangun dari beberapa atom dan ikatan. Metode *Group-contribution* digunakan untuk memprediksi sifat komponen murni dan campuran dengan menggunakan sifat gugus (group) atau atom (Skjold-Jorgensen dkk, 1979).

Salah satu metode estimasi koefisien aktivitas berdasarkan *group-contribution* adalah UNIQUAC *Functional-group Activity Coefficients* (UNIFAC). Pada metode UNIFAC, terdapat dua parameter yang menentukan koefisien aktivitasnya, yaitu parameter kombinatorial dan residual (Skjold-Jorgensen dkk, 1979).

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^r \quad (2.5)$$

Parameter kombinatorial menunjukkan parameter komponen murni, tidak bergantung pada komponen lain. Persamaan untuk parameter kombinatorial ditunjukkan oleh persamaan 2.6 (Skjold-Jorgensen dkk, 1979).

$$\ln \gamma_i^c = \ln \left(\frac{\phi_i}{x_i} \right) + 1 - \frac{\phi_i}{x_i} - \frac{z}{2} \left[\ln \frac{\phi_i}{\theta_i} + 1 - \frac{\phi_i}{\theta_i} \right] \quad (2.6)$$

Nilai ϕ_i dan θ_i berturut-turut menunjukkan volume molekular dan fraksi surface. Persamaan yang menyatakan volume molekular dan fraksi surface ditunjukkan oleh persamaan 2.7 dan 2.8 (Skjold-Jorgensen dkk, 1979).

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j^{nc} x_j r_j} \quad (2.7)$$

$$\theta_i = \frac{x_i \frac{z}{2} q_i}{\sum_j^{nc} x_j \frac{z}{2} q_j} \quad (2.8)$$

Nilai nc merupakan jumlah komponen atau senyawa dalam sistem. Nilai z (coordination number) adalah 10. Parameter r_i dan q_i dihitung berdasarkan group volume dan group area (Skjold-Jorgensen dkk, 1979).

$$r_i = \sum_k^{ng} v_{ki} R_k \quad (2.9)$$

$$q_i = \sum_k^{ng} v_{ki} Q_k \quad (2.10)$$

Parameter residual menunjukkan parameter yang dipengaruhi oleh komponen lain. Persamaan yang menyatakan parameter residual ditunjukkan oleh persamaan 2.11 (Skjold-Jorgensen dkk, 1979).

$$\ln \gamma_i^r = \sum_k^{ng} v_{ki} [\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^i] \quad (2.11)$$

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left(1 - \ln \sum_m^{ng} \theta_m \tau_{mk} - \sum_m^{ng} \left(\frac{\theta_m \tau_{km}}{\sum_n^{ng} \theta_n \tau_{nm}} \right) \right) \quad (2.12)$$

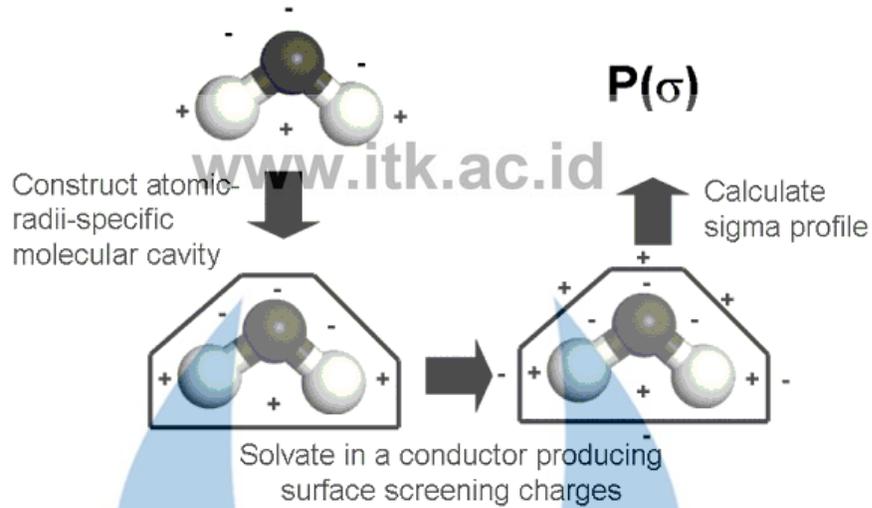
$$\tau_{mk} = \frac{-a_{mk}}{T} \quad (2.13)$$

a_{mk} merupakan parameter group interaction. Jika dalam suatu sistem terdapat 10 gugus fungsi maka total parameter group interaction-nya adalah $10 \times 2 = 20$. Hal ini karena nilai a_{mk} dan a_{km} berbeda. Sementara T adalah suhu sistem (Skjold-Jorgensen dkk, 1979).

2.4 Metode COSMO-SAC dalam Estimasi Koefisien Aktivitas

Model *Conductor-like Screening Model Segment Activity Coefficient* (COSMO-SAC) adalah model yang menggambarkan medan listrik pada permukaan molekul spesies yang dapat dipolarisasi. Ini membutuhkan perhitungan mekanika kuantum yang cukup rumit. Dalam bentuk akhirnya, model ini menggunakan atom individu sebagai dasar untuk memprediksi kesetimbangan fase. Formulasi model ini memberikan jangkauan aplikasi yang jauh lebih besar daripada metode *Group-contribution* (Lin dan Sandler, 2002).

Penghitungan untuk ketidakidealan fase cair hanya sedikit lebih intensif secara komputasi daripada model koefisien aktivitas seperti NRTL atau UNIQUAC. COSMO-SAC melengkapi metode UNIFAC, karena model ini berlaku untuk hampir semua sistem campuran (Lin dan Sandler, 2002).



Gambar 2.1 Skema Distribusi Muatan

(Mullins dkk, 2006)

Prinsip penentuan koefisien aktivitas oleh COSMO-SAC adalah sebagai berikut. Model ini menghasilkan distribusi muatan permukaan molekul. Tiap distribusi segmen area molekul memiliki *charge density* yang didefinisikan sebagai *sigma profile*. Nilai-nilai dari *sigma profile* ini nantinya akan digunakan dalam perhitungan koefisien aktivitas. Persamaannya adalah sebagai berikut (Lin dan Sandler, 2002).

$$\ln \gamma_i = \frac{A_i}{a_{eff}} \sum_{\sigma_m} p_i(\sigma_m) [\ln \Gamma_S(\sigma_m) - \ln \Gamma_i(\sigma_m)] + \ln \gamma_i^{SG} \quad (2.14)$$

A_i merupakan luas permukaan molekular komponen; a_{eff} merupakan luas permukaan segmen standar (7,5 angstroms persegi); $p_i(\sigma_m)$ merupakan *sigma profile* komponen i ; $\Gamma_S(\sigma_m)$ merupakan koefisien aktivitas dari segmen pada komponen i ; $\Gamma_i(\sigma_m)$ merupakan koefisien aktivitas dari segmen pada pelarut; dan γ_i^{SG} merupakan koefisien aktivitas berdasarkan model Staverman-Guggenheim. Nilai koefisien aktivitas segmen didefinisikan sebagai berikut (Lin dan Sandler, 2002).

$$\ln \Gamma_S(\sigma_m) = - \ln \left\{ \sum_{\sigma_n} p_S(\sigma_n) \Gamma_S(\sigma_n) \exp \left[\frac{-\Delta W(\sigma_m, \sigma_n)}{kT} \right] \right\} \quad (2.15)$$

$$\ln \Gamma_i(\sigma_m) = - \ln \left\{ \sum_{\sigma_n} p_i(\sigma_n) \Gamma_i(\sigma_n) \exp \left[\frac{-\Delta W(\sigma_m, \sigma_n)}{kT} \right] \right\} \quad (2.16)$$

Nilai $p_S(\sigma_n)$ merupakan *sigma profile* pada pelarut; dan $\Delta W(\sigma_m, \sigma_n)$ merupakan pertukaran energi antar segmen m dan n . Nilai *sigma profile* untuk komponen dan pelarut didefinisikan sebagai berikut (Lin dan Sandler, 2002).

$$p_i(\sigma) = \frac{A_i(\sigma)}{A_i} \quad (2.17)$$

$$p_s(\sigma) = \frac{\sum_i x_i A_i p_i(\sigma)}{\sum_i x_i A_i} \quad (2.18)$$

$$A_i = \sum_{\sigma} A_i(\sigma) \quad (2.19)$$

www.itk.ac.id

Nilai pertukaran energi dan koefisien aktivitas berdasarkan model Staverman-Guggenheim didefinisikan sebagai berikut (Lin dan Sandler, 2002).

$$\Delta W(\sigma_m, \sigma_n) = \frac{\alpha'}{2} (\sigma_m + \sigma_n)^2 + \Delta W^{HB}(\sigma_m, \sigma_n) \quad (2.20)$$

$$\ln \gamma_i^{SG} = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (2.21)$$

$\Delta W^{HB}(\sigma_m, \sigma_n)$ merupakan energi karena ikatan hidrogen. (Lin dan Sandler, 2002)

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_j x_j q_j} \quad (2.22)$$

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (2.23)$$

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (2.24)$$

$$r_i = \frac{V_i}{V_{eff}} \quad (2.25)$$

$$q_i = \frac{A_i}{A_{eff}} \quad (2.26)$$

V_i merupakan volume molekular komponen; V_{eff} merupakan volume molekular standar (66,69 angstrom kubik); A_{eff} merupakan luas permukaan molekular komponen standar (79,53 angstrom persegi); dan z merupakan *coordination number*, bernilai 10 (Mullins dkk, 2006).

2.5 Estimasi Tekanan Uap

Data tekanan uap cair pada kisaran suhu terbatas dapat dikorelasikan dengan persamaan Antoine, yang pada dasarnya berasal dari Persamaan Clausius–Clapeyron. Dengan tiga parameter, biasanya disajikan dalam bentuk berikut (Roosta dan Hekayati, 2016).

$$\ln p_i = C_{1i} + \frac{C_{2i}}{C_{3i} + T} \quad (2.27)$$

www.itk.ac.id

P adalah tekanan uap dan T adalah suhu. Persamaan Antoine bisa dikatakan sebagai korelasi tekanan uap paling populer saat ini. Hal ini dibuktikan dengan

banyaknya data parameter C_{1i} , C_{2i} , dan C_{3i} . Namun, ini memberikan representasi yang baik hanya pada kisaran suhu terbatas (Nannoolal, 2006). Bentuk yang lebih representatif dari persamaan ini, pertama kali diusulkan oleh Riedel (1954) dan disebut sebagai Persamaan *Extended Antoine*, yang dapat menangani rentang suhu yang lebih luas dengan tiga koefisien tambahan yang lebih disesuaikan. Persamaannya adalah sebagai berikut (Roosta dan Hekayati, 2016).

$$\ln p_i = C_{1i} + \frac{C_{2i}}{C_{3i}+T} C_{4i} T + C_{5i} \ln T + C_{6i} T^{C_{7i}} \quad (2.28)$$

Persamaan ini valid pada suhu C_{8i} hingga C_{9i} . Untuk memprediksi koefisien C_{1i} hingga C_{9i} , ada dua metode yang dipertimbangkan, yaitu metode Riedel dan Mani.

2.5.1 Metode Riedel

Metode Riedel memprediksi parameter untuk persamaan tekanan uap *Extended Antoine* dengan menerapkan parameter Riedel dan batasan Plank-Riedel pada titik kritis. Metode ini memanfaatkan kondisi bahwa pada titik didih normal, tekanan uapnya adalah 1 atm. Parameter ini valid dari *Normal boiling point* hingga suhu kritisnya. Metode ini akurat untuk senyawa nonpolar, tetapi tidak untuk senyawa polar (Riedel, 1954).

2.5.2 Metode Mani

Metode Mani dikembangkan oleh Juan-Carlos Mani dari Aspen Technology. Metode ini memprediksi parameter untuk persamaan tekanan uap *Extended Antoine* ketika satu atau dua pasangan data tekanan uap eksperimental tersedia. Data tersebut biasanya tersedia untuk bahan kimia specialty, terutama untuk molekul kompleks. Metode ini juga dapat digunakan untuk memprediksi *normal boiling point* dan suhu kritisnya (Mani, 2009).

Metode ini memberikan perkiraan *normal boiling point* (T_b), suhu kritis (T_c), dan kurva tekanan uap yang sangat akurat ketika beberapa nilai data tekanan uap eksperimental tersedia. Ini sangat berguna untuk senyawa kompleks. Persamaan tekanan uap berlaku dari titik data suhu terendah ke suhu kritis. Jika satu pasangan T-P (Tekanan uap P pada suhu tertentu T) tersedia, dan T_c dan P_c (Tekanan kritis) diketahui atau diperkirakan, persamaan tersebut dapat digunakan untuk memberikan perkiraan T_b dan tekanan uap. Ketika dua pasang T-P tersedia dan P_c diketahui atau diperkirakan, persamaan tersebut dapat memberikan perkiraan T_b , T_c , dan tekanan uap (Mani, 2009).

2.6 Model Panas Penguapan

Penentuan panas laten atau panas penguapan zat murni sangat penting untuk banyak aplikasi praktis yang penting. Prediksi panas penguapan dibahas dalam banyak publikasi. Reid et al. (1977) dan Fishtine (1963) menyajikan pemodelan yang sangat baik dari pekerjaan sebelumnya. Sebelumnya, Watson (1943) membangun korelasi antara panas laten penguapan dan suhu. Persamaannya adalah sebagai berikut (Zhong, 1984).

$$\Delta_{vap}H_i^*(T) = \Delta_{vap}H_i^*(T_1) \left(\frac{1-T_r}{1-T_{1r}} \right)^n \quad (2.29)$$

$\Delta_{vap}H_i^*(T_1)$ adalah panas penguapan referensi pada suhu T_1 . n adalah konstanta dengan nilai 0,38. Silverberg dan Wenzel (1965) menemukan bahwa n bervariasi untuk senyawa yang berbeda. Untuk 44 senyawa, nilai rata-rata adalah 0,378, yaitu sekitar nilai yang dilaporkan oleh Watson. T_r merupakan reduced temperature. Hubungan antara reduced temperature dengan suhu adalah sebagai berikut (Zhong, 1984).

$$T_r = \frac{T}{T_{ci}} \quad (2.30)$$

$$T_{1r} = \frac{T_1}{T_{ci}} \quad (2.31)$$

Sejauh ini, persamaan Watson direkomendasikan untuk perhitungan engineering. Namun, nilai n yang konstan (0,38) dalam persamaan Watson sebenarnya tidak konstan, karena, nilai n tergantung pada suhu dan zat yang dimaksud. Korelasi nilai n terhadap suhu adalah sebagai berikut (Zhong, 1984).

$$n = a_i + b_i(1 - T/T_{ci}) \quad (2.32)$$

Sehingga, persamaan Watson akan menjadi seperti berikut. Persamaan ini valid dari suhu T_{min} (Zhong, 1984).

$$\Delta_{vap}H_i^*(T) = \Delta_{vap}H_i^*(T_1) \left(\frac{1-T/T_{ci}}{1-T_1/T_{ci}} \right)^{a_i+b_i(1-T/T_{ci})} \quad (2.34)$$

Persamaan ini valid dari suhu T_{min} .

2.7 Multicomponent Distillation

Dalam distilasi multikomponen, kondisi refluks minimum dan total refluks dimodelkan terlebih dahulu. Komponen kunci harus ditetapkan terlebih dahulu, yaitu satu komponen berat dan satu komponen ringan. Pada desain awal, persen *recovery* komponen ringan dan komponen berat harus dispesifikasi. Pada kondisi total refluks jumlah *stage* akan minimum. Jumlah *stage* minimum dinyatakan dalam persamaan berikut (Smith, 2005).

$$N_{min} = \frac{\log\left[\frac{r_{L,D}}{1-r_{L,D}} \times \frac{r_{H,B}}{1-r_{H,B}}\right]}{\log \alpha_{LH}} \quad (2.35)$$

Nilai $r_{L,D}$ dan $r_{H,B}$ berturut-turut merupakan fraksi *recovery* komponen ringan di distilat dan komponen berat di *bottom*; dan α_{LH} merupakan volatilitas relatif komponen ringan terhadap komponen berat. Selanjutnya perbandingan jumlah distilat dengan *bottom* untuk komponen berat ditentukan sebagai referensi (Smith, 2005).

$$\frac{d_H}{b_H} = \frac{1-r_{H,B}}{r_{H,B}} \quad (2.36)$$

Jumlah distilat dan *bottom* untuk komponen lain ditentukan oleh persamaan berikut. (Smith, 2005)

$$d_i = \frac{\alpha_{iH}^{N_{min}} f_i \left(\frac{d_H}{b_H}\right)}{1 + \alpha_{iH}^{N_{min}} \left(\frac{d_H}{b_H}\right)} \quad (2.37)$$

$$d_i = \frac{f_i}{1 + \alpha_{iH}^{N_{min}} \left(\frac{d_H}{b_H}\right)} \quad (2.38)$$

Nilai f_i merupakan jumlah *feed* komponen i . Jumlah refluks minimum yang diperlukan adalah sebagai berikut (Smith, 2005).

$$R_{min} = \sum_{i=1}^{NC} \frac{\alpha_{ij} x_{i,D}}{\alpha_{ij} - \theta} - 1 \quad (2.39)$$

NC merupakan jumlah komponen; $x_{i,D}$ merupakan fraksi komponen i di distilat; dan θ merupakan *root of equation* dan ditentukan berdasarkan iterasi dari persamaan berikut (Smith, 2005).

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{\alpha_{ij} x_{i,F}}{\alpha_{ij} - \theta} = 1 - q \quad (2.40)$$

X_{i,F} merupakan fraksi komponen i pada *feed*; q merupakan kondisi *feed*. Jika kondisi *feed* adalah *saturated liquid* maka nilai q adalah 1. Jika kondisi *feed* adalah *saturated vapor* maka nilai q adalah 0. Jika rasio refluks yang diinginkan adalah tertentu, maka penentuan jumlah *stage* adalah sebagai berikut (Smith, 2005).

$$Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1} \quad (2.41)$$

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (2.42)$$

$$Y = 0,2788 - 1,3154X + 0,4114X^{0,291} + 0,8268 \ln X + 0,902 \ln \left(X + \frac{1}{X} \right) \quad (2.43)$$

Dimana X dan Y merupakan parameter korelasi.

2.8 Penelitian Terdahulu

Penelitian terdahulu dilampirkan sebagai berikut:

No	Publikasi	Ringkasan
1	Dantas dkk, 2020	Eksperimen <i>enriching patchoulol</i> dari komponen lain pada minyak nilam dengan <i>molecular distillation</i> pada tekanan vakum 0,1 mbar. Variabel yang digunakan adalah suhu evaporator, suhu kondenser dan kecepatan putaran agitasi. Hasil optimum didapatkan pada variabel suhu evaporator 85 °C, suhu kondenser 10 °C, dan kecepatan putaran agitasi 600 RPM. Hasil yang didapatkan adalah konsentrasi patchoulol 62,344% dan <i>recovery</i> 74,22 %.
2	Almeida dkk, 2018	Pada penelitian ini, ekstraksi minyak atsiri dari <i>Achyrocline satureioides</i> dilakukan dengan <i>steam distillation</i> . Kemudian dilakukan simulasi <i>enrichment</i> senyawa mayor dari hasil ekstraksi dengan <i>batch distillation</i> . Tekanan uap diestimasi menggunakan metode Corresponding State – Group Contribution (CSGC). Simulasi berhasil menghasilkan α-pinene dengan kemurnian 99,10%.

-
- 3 Almeida dkk, 2017 Simulasi fraksinasi *E. globulus* dan *E. citriodora* masing-masing mengisolasi senyawa eucalyptol dan citronellal. Tekanan uap diestimasi menggunakan metode Corresponding State – Group Contribution (CSGC); dan koefisien aktivitas diestimasi dengan metode COSMO-SAC. Simulasi untuk *E. globulus* memungkinkan memprediksi kemurnian tinggi *recovery* eucalyptol (98,89%) dan α -pinene 98,82%. Untuk *E. citriodora* dua fraksi utama diperoleh, isopulegol (99,21%) dan sitronelal (90,03%).
-
- 4 Asadi, 2014 Pada penelitian ini, dilakukan simulasi distilasi *spearment oil* untuk *enrichment* komponen mayor. Simulasi menggunakan metode *bubble-point*, algoritma Wang-Henke, dan model prediktif Soave-Redlich-Kwong (PSRK). Hasil simulasi divalidasi dengan data eksperimental pada sistem *pilot-plant*. Hasil simulasi cukup bersesuaian dengan data eksperimen. Penambahan *tray* pada kolom dengan sedikit *tray* lebih efektif daripada penambahan *tray* pada kolom dengan *tray* banyak. Penambahan *reflux ratio* dari 2 menjadi 3 dapat meningkatkan *enrichment* komponen mayor dari 62,04% menjadi 67,04%.
-
- 5 Milojevic dkk, 2010 Simulasi fraksinasi *Juniperus communis* untuk mengisolasi senyawa alpha-pinene. Tekanan uap diestimasi dengan persamaan Antoine *extended*; dan pemodelan menggunakan metode Peng-Robinson EOS. Koefisien aktivitas memiliki nilai 1 karena komponen pada minyak sejenis yaitu terpena. Model ini berkorelasi baik dengan data eksperimen. Optimasi spesifikasi kolom dilakukan dengan variabel jumlah *stage* dan refluks. Didapatkan kondisi optimum yang paling ekonomis adalah 25 *stage* dan refluks 7 (99% alpha-pinene).
-