



Prediksi Kesetimbangan Uap-Cair Sistem Biner 3-Pentanol + Asam Propionat Sebagai Basis Pada Proses Desain Pemurnian Biofuel

Andi Setyo Bekti¹, Pradnya Paramitha¹, Saidah Altway^{1*}, dan Agung Ari Wibowo²

¹Departemen Teknik Kimia Industri, FV, ITS Jalan Raya ITS Sukolilo Kota Surabaya Jawa Timur 60111

²Jurusan Teknik Kimia, Politeknik Negeri Malang, Jalan Soekarno Hatta No.9 Jatimulyo Lowokwau Kota Malang Jawa Timur 65141

*E-mail: saidahaltway@chem-eng.its.ac.id

Abstract

The depletion of fossil fuels has led to a turn toward renewable and cleaner diesel fuel. In recent years, research has focused on the development of green energy to replace fossil fuels. 3-Pentanol is the preferred alternative fuel because it has better fuel properties compared to other biofuels. 3-Pentanol, as a propionic acid derivative chemical platform, can be produced from renewable biomass through the lactic acid pathway. Therefore, to obtain 3-Pentanol with high purity, a purification process such as distillation is required. Vapor-liquid equilibrium data and the thermodynamic model parameters are needed as basis for designing a distillation column and optimizing the separation process. The aim of this study is to predict the vapor-liquid equilibria (VLE) of the binary systems of 3-Pentanol + propionic acid at 100 kPa, 200 kPa, and 300 kPa using the UNIFAC model in combination with the Hayden-O'Connell model. The prediction results showed no azeotropes found for the studied systems. This study can also open a scope for the thermodynamic studies of biofuel separation process.

Keywords: Biofuel; 3-Pentanol; Propionic acid; UNIFAC-HOC; Vapor-liquid equilibrium

Pendahuluan

Dalam beberapa tahun terakhir, telah dikembangkan suatu pendekatan untuk konversi asam propionate menjadi bahan kimia yang berharga menghasilkan 3-pentanol sebagai *biofuel*. 3-Pentanol dianggap sebagai senyawa *biogasoline* generasi kedua karena nilai oktannya yang tinggi (>100 *Research Octane Number*). Selain itu, 3-pentanol juga memiliki toleransi air yang sangat baik, dan panas pembakaran yang sangat tinggi (Moreau *et al.*, 2016). 3-Pentanol juga memiliki volatilitas tinggi, *auto ignition-temperature* rendah (-40°C), dan kandungan oksigen tinggi (21,6%) dari dietil eter (DEE), yang menjadikannya aditif bahan bakar yang sesuai untuk meningkatkan sifat bahan bakar campuran biodiesel dan alkohol. Telah dipastikan bahwa pentanol memiliki kinerja yang lebih baik untuk aplikasi di mesin pengapian kompresi dan diperlakukan sebagai alternatif diesel yang paling menjajikan (Feng *et al.*, 2021). Akan tetapi, dalam reaksi ketonisasi asam propionate tidak terkonversi sepenuhnya menjadi 3-pentanol (Kumar *et al.*, 2018). Oleh karena itu, untuk mendapatkan 3-pentanol dengan kemurnian tinggi diperlukan proses pemurnian seperti distilasi, ekstraksi, adsorpsi, dan ultrafiltrasi. Metode pemisahan fisik secara konvensional seperti distilasi lebih disukai oleh industri, karena prinsip kerjanya yang cukup mudah dan murah serta metode distilasi juga banyak digunakan dalam produksi bahan bakar secara luas di industri (Schmitz *et al.*, 2018).

Dalam perancangan desain *biofuel* skala industri untuk mendapatkan bahan bakar dengan kemurnian tinggi diperlukan data kesetimbangan uap-cair untuk meningkatkan optimasi *biofuel* yang dihasilkan. Data kesetimbangan uap-cair memiliki peranan penting, yaitu sebagai acuan untuk perancangan kolom distilasi ataupun optimasi proses distilasi (Schmitz *et al.*, 2018). Beberapa penelitian terkait pengukuran kesetimbangan uap-cair *biofuel* yang telah dilakukan yaitu pengukuran kesetimbangan uap-cair sistem (1-pentanol + 2,2,4-trimethylpentane) dan (2-pentanol + 2,2,4-trimethylpentane). Dari beberapa penelitian tersebut, belum tersedia data pengukuran kesetimbangan uap-cair pada sistem (3-pentanol + asam propionat) sehingga pada penelitian ini melakukan prediksi kesetimbangan uap-cair dari sistem biner 3-pentanol + asam propionate pada tekanan 100 kPa, 200 kPa, dan 300 kPa menggunakan model UNIFAC yang dikombinasikan dengan model *Hayden-O'Connell*.

Metode Penelitian

Prediksi kesetimbangan uap-cair sistem 3-pentanol + asam propionat menggunakan aplikasi Aspen Plus V11. Prediksi kesetimbangan uap-cair ini menggunakan model UNIFAC yang kemudian dikorelasikan dengan *Hayden-O'Connell* pada tekanan 100 kPa, 200 kPa, dan 300 kPa. Model UNIFAC (*UNIQUAC Functional-group Activity*



Coefficients) merupakan model yang berbasis persamaan UNIQUAC dengan menggunakan gugus fungsi suatu molekul yang terdapat dalam campuran untuk menghitung koefisien aktivitas. Persamaan UNIFAC menggunakan kelompok fungsional pada molekul yang membentuk campuran untuk menghitung koefisien aktivitas dengan memanfaatkan interaksi untuk masing-masing kelompok fungsional pada molekul. Menurut Nugroho *et al* (2017), persamaan UNIFAC terdiri dari bagian kombinatorial dan bagian residual pada persamaan (1).

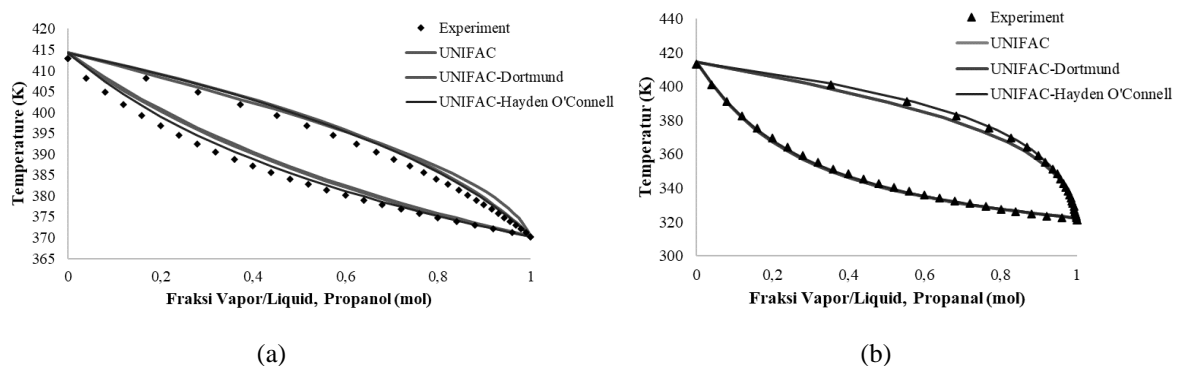
$$\ln \gamma_i = \left(1 - V_i + \ln V_i - \frac{z}{2} q_i \left(1 - \frac{V_i}{F_i} + \ln \frac{V_i}{F_i}\right)\right) + \left(\sum_k^N V_k^{(i)} [\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(i)}]\right) \quad (1)$$

Kemudian dikorelasikan dengan *Hayden-O'Connell* yang merupakan pendekatan untuk menggambarkan perilaku dua campuran biner polar dalam fase uap pada tekanan rendah hingga sedang (Avoseh *et al.*, 2018). Persamaan *Hayden-O'Connell* menggabungkan teori kimia dimerisasi. Model ini memperhitungkan efek asosiasi dan solvasi yang kuat, termasuk yang ditemukan dalam sistem yang mengandung asam organik seperti asam propionat (George Hayden dan O'Connell, 1975). Persamaan *Hayden-O'Connell* adalah yang tertera pada persamaan (2)

$$Zm = 1 + \frac{B_p}{RT} \quad (2)$$

Hasil dan Pembahasan

Beberapa penelitian sebelumnya terkait pengukuran data kesetimbangan uap-cair untuk sistem yang melibatkan golongan asam karboksilat telah diselidiki sebelumnya yang dilakukan oleh Gao *et al.*, (2010) seperti sistem Propanol (1) + Asam Propionat (2) pada tekanan 100 kPa dan Propanal (Propionaldehyde) (1) + Asam Propionat (2) pada tekanan 100 kPa yang dapat dilihat pada **Gambar 1(a) dan 1(b)**. Pada penelitian ini dilakukan prediksi menggunakan Aspen Plus V11 dengan membandingkan data yang ada pada literatur dengan beberapa model termodinamika sebagai validasi. Model UNIFAC menunjukkan nilai deviasi yg cukup rendah dgn nilai Root Mean Square Deviation Temperature (RMSD T) menunjukkan nilai berturut-turut sebesar 2,70% dan 1,99%. Nilai error ini disebabkan karena model UNIFAC tidak dapat mendefinisikan non-idealitas dari komponen asam organik (golongan senyawa asam karboksilat). Berbagai upaya dilakukan untuk mengatasi batasan dari model UNIFAC, salah satunya adalah UNIFAC-Dortmund. Pada model ini, bagian kombinatorial dimodifikasi untuk meningkatkan hasil sistem asimetris sehingga hasil prediksi menjadi lebih akurat dibandingkan dengan model sebelumnya (Constantinescu dan Gmehling, 2016). Hasil prediksi pada data yang serupa dilakukan dengan model UNIFAC-Dortmund dimana model ini menunjukkan kehandalan prediksi data yang cukup tinggi dimana *Root Mean Square Deviation Temperature* (RMSD T) menunjukkan nilai berturut-turut sebesar 2,37% dan 1,43%. Dari kedua model UNIFAC dan UNIFAC-Dortmund menunjukkan hasil yang sudah cukup baik dengan RMSD berkisar 2-3%. Tetapi, untuk meningkatkan keakuratan dapat menggunakan model *UNIFAC-Hayden O'Connell*. Model *UNIFAC-Hayden O'Connell* menunjukkan hasil yang cukup baik dimana *Root Mean Square Deviation Temperature* (RMSD T) menunjukkan nilai berturut-turut sebesar 1,51% dan 1,05%. Dari nilai RMSD yang diperoleh ini menunjukkan bahwa model *Hayden O'Connell* dapat memprediksi sistem secara akurat, khususnya untuk konsentrasi rendah. Sedangkan untuk memperoleh hasil yang lebih akurat pada prediksi sistem perlu dilakukan optimasi model termodinamika sebelum diaplikasikan dengan model Hayden O'Connell (Wang *et al.*, 2019).



Gambar 1. (a) Perbandingan Hasil Prediksi dan Eksperimen Sistem Propanol (1) + Asam Propionat (2) pada tekanan 101,3 kPa dengan Berbagai Model Termodinamika Prediktif (b) Perbandingan Hasil Prediksi dan Eksperimen Sistem Propanal (1) + Asam Propionat (2) pada tekanan 101,3 kPa dengan berbagai Model Termodinamika Prediktif.

Pada penelitian ini, data kesetimbangan uap-cair diprediksi dengan model termodinamika UNIFAC yang dikombinasikan dengan model *Hayden-O'Connell*. Nilai dari tekanan uap komponen, dihitung dengan menggunakan persamaan *Antoine* sebagai berikut

$$\ln P_i^{sat} = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad (3)$$

Tabel 1. Konstanta Antoine 3-Pentanol dan Asam Propionat

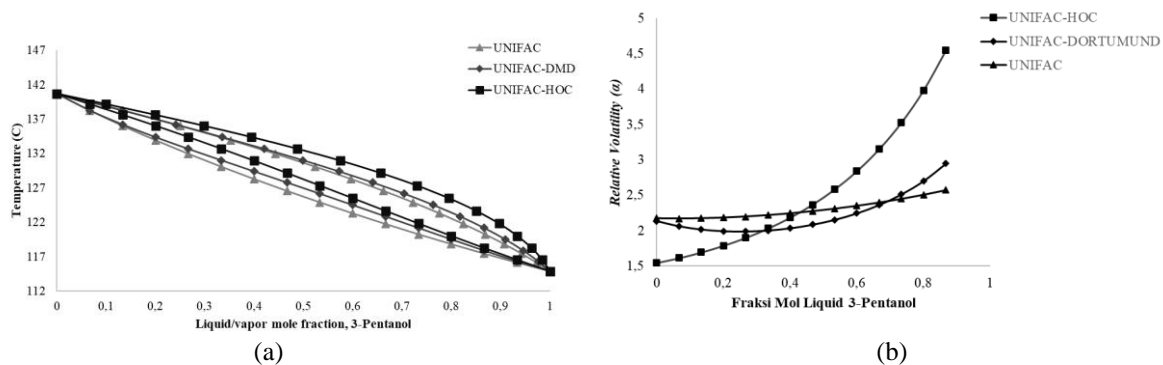
Komponen	Ai	Bi	Ci	Reff.
3-Pentanol (torr)	6,7265	1014,7	125,13	(Van Diemen, Houtepen dan Stein, 1976)
Asam Propionat (bar)	4,74558	1679,869	-59,832	(Dreisbach dan Shrader, 1949)

Dimana konstanta A_i , B_i , dan C_i dalam persamaan tersebut merupakan konstanta Antoine yang dapat dilihat pada **Tabel 2.** sebagai berikut

Tabel 2. Parameter R_k dan Q_k 3-Pentanol dan Asam Propionat pada model UNIFAC
 Sumber: (Poling dan Prausnitz, 2001)

Komponen	Main Group	Sub-group	No	Vk	R_k	Q_k	R	Q
3-Pentanol	1	CH ₃	1	2	0,9011	0,848		
	1	CH ₂	2	2	0,6744	0,540	4,5959	3,952
	1	CH	3	1	0,4469	0,228		
	10	C-OH	20	1	0,9980	0,948		
Propionic Acid	1	CH ₃	1	1	0,9011	0,848		
	1	CH ₂	2	1	0,6744	0,540	2,8768	2,612
	20	COOH	42	1	1,3013	1,224		

Berdasarkan perhitungan yang telah dilakukan, diperoleh data hasil prediksi sistem 3-pentanol (1) + asam propionat (2) menggunakan model UNIFAC-Hayden O'Connell. Data yang didapat dengan model UNIFAC-Hayden O'Connell juga di bandingkan dengan model termodinamika yang lainnya menggunakan *Modified UNIFAC Dortmund* dan UNIFAC yang dapat dilihat pada Grafik sebagai berikut



Gambar 2. (a) Hasil Prediksi Sistem 3-Pentanol + Asam Propionat pada Beberapa Model Termodinamika (b) Hasil Prediksi *Relative Volatility* pada Beberapa Model Termodinamika.

Hasil prediksi pada ketiga model termodinamika ditunjukkan pada **Gambar 2 (a)** yang memberikan profil yang sama yaitu mengikuti hukum Raoult Modifikasi dan tidak terbentuk azeotrop pada sistem tersebut pada tekanan 100 kPa. Model termodinamika UNIFAC dapat memprediksi perilaku dari kesetimbangan uap cair suatu campuran (biner dan lebih tinggi) menggunakan volume *van der Waals* (R_k) dan luas permukaan molekul (Q_k), serta *group interaction parameter* dari suatu campuran. Namun, model UNIFAC memiliki keterbatasan dimana data VLE (biasanya diukur untuk fraksi mol cair antara 0,02 dan 0,98) tidak memberikan informasi tentang daerah encer dan ketergantungan temperatur dari koefisien aktivitas. Selain itu, data VLE lengkap untuk campuran asimetris yang kuat (mengandung molekul dengan bentuk dan ukuran yang sangat berbeda) jarang terjadi dan hanya memberikan informasi γ_i eksperimental yang handal untuk komponen dengan titik didih rendah (Dreisbach dan Shrader, 1949).

Pada penelitian ini, dilakukan prediksi kesetimbangan uap-cair yang melibatkan asam propionat yang merupakan golongan senyawa asam karboksilat. Golongan asam karboksilat selalu hadir dalam bentuk gabungan, seperti dimer atau trimer, baik dalam fase uap maupun cair bahkan pada tekanan rendah. Hal ini menunjukkan bahwa senyawa golongan asam karboksilat menunjukkan perilaku larutan non-ideal (Yushu *et al.*, 2012). Untuk memperhitungkan perilaku non-ideal dalam suatu campuran, biasanya digunakan koefisien fugasitas untuk menghitung non-idealitas dalam fase uap (Zaitseva *et al.*, 2014). Oleh karena itu, model UNIFAC-Hayden O'Connell dapat memprediksi perilaku kesetimbangan uap-cair sistem 3-Pentanol (1) + asam propionat (2) dengan baik dibandingkan model lain. Model *Hayden O'Connell* dapat memperhitungkan koefisien aktivitas fase cair yang diperoleh dari tekanan uap total

berdasarkan metode kuadrat terkecil, yang karena sifatnya yang fleksibel cocok untuk memprediksi perilaku non-ideal fase cair secara akurat (Gao *et al.*, 2010).

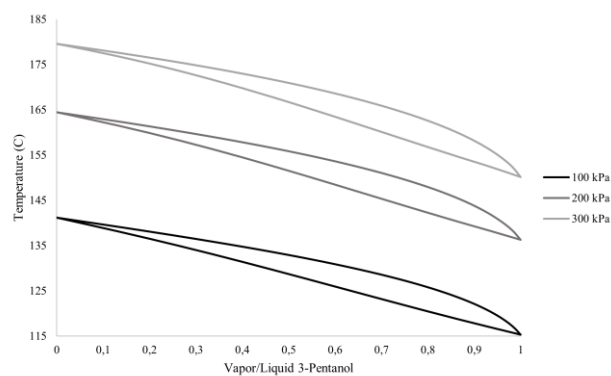
Relative volatility komponen i (α_i) merupakan parameter yang menyatakan distribusi fase dalam kesetimbangan uap-cair dibandingkan dengan *heavy component* dalam suatu campuran. *Relative volatility* menyatakan seberapa mudah komponen dalam suatu campuran untuk dipisahkan. **Gambar 2 (b)** menunjukkan *relative volatility* berdasarkan prediksi data kesetimbangan uap-cair dengan model termodinamika UNIFAC, UNIFAC-Dordmund, dan UNIFAC-Hayden-O'Connell. Berdasarkan hasil grafik, model UNIFAC-Hayden O'Connell menunjukkan reabilitas yang baik dibandingkan model lainnya karena model ini dapat merepresentasikan sifat non-idealitas dari campuran ini. Nilai *relative volatility* dari model ini menunjukkan nilai $\alpha > 1$ yang menunjukkan adanya perbedaan yang cukup besar dalam tekanan uap dari kedua komponen, sehingga campuran ini (3-pentanol + asam propionat) dapat dengan mudah dipisahkan, khususnya dengan metode distilasi biasa. Selain itu, nilai *relative volatility* yang menunjukkan nilai $\alpha > 1$ sehingga tidak terdapat titik azeotrop dalam sistem (McCormick *et al.*, 1963).

Selanjutnya dilakukan prediksi kesetimbangan uap-cair sistem 3-Pentanol (1) + Propionic Acid (2) pada tekanan 100 kPa, 200 kPa, dan 300 kPa untuk mengetahui perilaku kesetimbangan uap-cair pada sistem ini dan pengaruh tekanan terhadap grafik kesetimbangan yang dapat dilihat pada grafik sebagai berikut

Tabel 3 Data Prediksi Kesetimbangan Uap-Cair Sistem 3-pentanol + Asam Propionat pada Beberapa Tekanan dengan model UNIFAC-HOC

Sistem	Temperatur (°C)	x_1	y_1	x_2	y_2	Relative Volatility (α_{12})
3-pentanol + Asam Propionat pada 100 kPa	139,627	0,0994	0,0667	0,9005	0,9333	1,54
	138,078	0,1988	0,1333	0,8011	0,8667	1,61
	136,482	0,2974	0,2000	0,7025	0,8000	1,69
	134,834	0,3940	0,2667	0,6059	0,7333	1,78
	133,132	0,4871	0,3333	0,5129	0,6667	1,89
	131,38	0,5752	0,4000	0,4248	0,6000	2,03
	129,585	0,6566	0,4667	0,3434	0,5333	2,18
	127,759	0,7301	0,5333	0,2699	0,4667	2,36
	125,915	0,7949	0,6000	0,2051	0,4000	2,58
	124,067	0,8504	0,6667	0,1496	0,3333	2,84
	122,23	0,8966	0,7333	0,1034	0,2667	3,15
	120,42	0,9338	0,8000	0,0662	0,2000	3,52
118,654	0,9628	0,8667	0,0372	0,1333	3,98	
116,946	0,9845	0,9333	0,0155	0,06667	4,54	
3-pentanol + Asam Propionat pada 200 kPa	162,977	0,0950	0,0667	0,9050	0,9333	1,46
	161,456	0,1910	0,1333	0,8090	0,8667	1,53
	159,845	0,2871	0,2000	0,7129	0,8000	1,61
	158,142	0,3821	0,2667	0,6179	0,7333	1,70
	156,346	0,4744	0,3333	0,5256	0,6667	1,80
	154,465	0,5623	0,4000	0,4377	0,6000	1,92
	152,509	0,6442	0,4667	0,3558	0,5333	2,06
	150,495	0,7187	0,5333	0,2813	0,4667	2,23
	148,44	0,7847	0,6000	0,2153	0,4000	2,43
	146,363	0,8417	0,6667	0,1583	0,3333	2,65
	144,287	0,8896	0,7333	0,1104	0,2667	2,93
	142,231	0,9286	0,8000	0,0714	0,2000	3,25
140,215	0,9594	0,8667	0,0406	0,1333	3,63	
138,259	0,9829	0,9333	0,0171	0,0667	4,09	
3-pentanol + Asam Propionat pada 300 kPa	178,238	0,0914	0,0667	0,9086	0,9333	1,40
	176,789	0,1845	0,1333	0,8155	0,8667	1,47
	175,223	0,2785	0,2000	0,7215	0,8000	1,54

173,533	0,3720	0,2667	0,6280	0,7333	1,62
171,72	0,4635	0,3333	0,5365	0,6667	1,72
169,792	0,5512	0,4000	0,4488	0,6000	1,84
167,76	0,6335	0,4667	0,3665	0,5333	1,97
165,643	0,7089	0,5333	0,2911	0,4667	2,13
163,462	0,7761	0,6000	0,2239	0,4000	2,31
161,241	0,8345	0,6667	0,1655	0,3333	2,52
159,005	0,8838	0,7333	0,1162	0,2667	2,76
156,779	0,9244	0,8000	0,0756	0,2000	3,05
154,587	0,9567	0,8667	0,0433	0,1333	3,39
152,452	0,9816	0,9333	0,0184	0,0667	3,80



Gambar 3. Hasil Prediksi Sistem 3-Pentanol + Asam Propionat Pada Beberapa Tekanan

Hasil prediksi pada ketiga tekanan pada **Gambar 3** menunjukkan bahwa semakin tinggi tekanan maka *boiling point* pada sistem 3-Pentanol + Asam Propionat semakin tinggi. Berdasarkan yang telah tertera pada **Tabel 3** *boiling point* pada asam propionat pada tekanan 100 kPa yakni sebesar 140°C, kemudian pada tekanan 200 kPa meningkat 1,2 kali menjadi 163°C dan pada tekanan 300 kPa meningkat 1,3 kali menjadi 178°C. Sedangkan *boiling point* pada 3-pentanol pada tekanan 100 kPa yakni sebesar 117°C, kemudian pada tekanan 200 kPa meningkat 1,2 kali menjadi 138°C dan pada tekanan 300 kPa meningkat 1,3 kali menjadi 152°C. Selain itu, nilai *relative volatility* campuran pada ketiga tekanan dapat dilihat pada **Tabel 3** yang menunjukkan bahwa nilai $\alpha > 1$. Jika *relative volatility* menunjukkan nilai $\alpha = 1$, pemisahan keduanya tidak dapat dilakukan menggunakan distilasi biasa karena pada kondisi tersebut komposisi fase cair dan uapnya sama (azeotrop). Namun jika nilai $\alpha > 1$ maka pemisahan dengan distilasi biasa semakin mudah (Ruiz and Ruiz, 2016).

Kesimpulan

Pada penelitian ini dilakukan prediksi data kesetimbangan uap-cair sistem biner 3-pentanol + asam propionat pada tekanan 100 kPa, 200 kPa, dan 300 kPa dengan beberapa model termodinamika. Model UNIFAC-Hayden O'Connell dapat memprediksi perilaku kesetimbangan uap-cair sistem 3-Pentanol (1) + Propionic Acid (2) dengan baik dibandingkan model lain, karena dapat memperhitungkan perilaku non-ideal dalam suatu campuran, biasanya digunakan koefisien fugasitas untuk menghitung non-idealitas dalam fase uap. *Relative volatility* dengan nilai $\alpha > 1$ menunjukkan adanya perbedaan yang cukup besar dalam tekanan uap dari kedua komponen, sehingga campuran ini (3-pentanol + asam propionat) dapat dengan mudah dipisahkan, khususnya dengan metode distilasi biasa. Selain itu, nilai *relative volatility* yang menunjukkan nilai $\alpha > 1$ sehingga tidak terdapat titik azeotrop dalam sistem tersebut.

Daftar Notasi

- P = tekanan [kPa]
- T = temperatur [K]
- γ = Koefisien Aktivitas
- α = *Relative Volatility*
- x_1 = Fraksi mol uap 3-pentanol
- x_2 = Fraksi mol uap asam propionat



y_1 = Fraksi mol cair 3-pentanol
 y_2 = Fraksi mol cair asam propionate

Daftar Pustaka

- Avoseh, F. *et al.* (2018) 'Isothermal Vapor-Liquid Equilibrium for the 2-Pentanone (MPK) + 2-Methyl Propan-1-ol Binary Mixture', *Journal of Chemical and Engineering Data*, 63(11), pp. 4076–4084. doi: 10.1021/acs.jced.8b00517.
- Constantinescu, D. and Gmehling, J. (2016) 'Further development of modified UNIFAC (Dortmund): Revision and extension 6', *Journal of Chemical and Engineering Data*, 61(8), pp. 2738–2748. doi: 10.1021/acs.jced.6b00136.
- Van Diemen, A. J. G., Houtepen, C. J. M. and Stein, H. N. (1976) 'Thermodynamic properties of 3-pentanol + diethylamine mixtures', *Thermochimica Acta*, 15(1), pp. 55–61.
- Dreisbach, R. R. and Shrader, S. A. (1949) 'Vapor Pressure–Temperature Data on Some Organic Compounds', *Industrial & Engineering Chemistry*, 41(12), pp. 2879–2880. doi: 10.1021/ie50480a054.
- Feng, Y. *et al.* (2021) 'Theoretical and Experimental Study of 3-Pentanol Autoignition: Ab Initio Calculation, Shock Tube Experiments, and Kinetic Modeling', *Journal of Physical Chemistry A*, 125(27), pp. 5976–5989. doi: 10.1021/acs.jpca.1c02713.
- Gao, D. *et al.* (2010) 'Isobaric vapor - Liquid equilibria for binary and ternary mixtures of propanal, propanol, and propanoic acid', *Journal of Chemical and Engineering Data*, 55(12), pp. 5887–5895. doi: 10.1021/je100912t.
- George Hayden, J. and O'Connell, J. P. (1975) 'A Generalized Method for Predicting Second Virial Coefficients', *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 14(3), pp. 209–216. doi: 10.1021/i260055a003.
- Kumar, R. *et al.* (2018) 'Ketonization of oxygenated hydrocarbons on metal oxide based catalysts', *Catalysis Today*, 302(August 2017), pp. 16–49. doi: 10.1016/j.cattod.2017.09.044.
- McCormick, R. H. *et al.* (1963) 'Relative Volatility Data for Isopentane; n-Pentane Mixtures', *Journal of Chemical and Engineering Data*, 8(4), pp. 504–508. doi: 10.1021/je60019a009.
- Moreau, A. *et al.* (2016) 'Thermodynamics properties, VLE and HE, of the systems 2-pentanol and cyclohexane or methylbenzene for contributing to the knowledge of new biofuels', *Fluid Phase Equilibria*, 409, pp. 92–97. doi: 10.1016/j.fluid.2015.09.035.
- Nugroho, F. D. *et al.* (2017) 'Prediksi kesetimbangan uap-cair sistem biner tert-butanol (1) + 1-propanol (2) menggunakan UNIFAC', *Jurnal Kompetensi Teknik*, 9(1), pp. 29–36.
- Poling, B. E. and Prausnitz, J. M. (2001) *The Properties of Gases and Liquids*. 5th edn, McGraw-Hill Education. 5th edn. McGraw-Hill Education.
- Ruiz, D. J. B. and Ruiz, D. A. E. B. (2016) 'Self-optimization of distillation sequences using DSE parameter.', (J), pp. 7–8.
- Schmitz, N. *et al.* (2018) 'Vapor–liquid equilibrium and distillation of mixtures containing formaldehyde and poly(oxymethylene) dimethyl ethers', *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 131, pp. 116–124. doi: 10.1016/j.cep.2018.06.012.
- Wang, Y. *et al.* (2019) 'Isobaric vapor-liquid equilibrium of a ternary system of ethyl acetate + propyl acetate + dimethyl sulfoxide and binary systems of ethyl acetate + dimethyl sulfoxide and propyl acetate + dimethyl sulfoxide at 101.3 kPa', *Journal of Chemical Thermodynamics*, 135, pp. 116–123. doi: 10.1016/j.jct.2019.03.036.
- Yushu, C. *et al.* (2012) 'Thermodynamic modeling of mixtures containing carboxylic acids using the PC-SAFT equation of state', *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 51(42), pp. 13846–13852. doi: 10.1021/ie301930q.
- Zaitseva, A. *et al.* (2014) 'Isothermal vapor-liquid equilibrium and excess molar enthalpies of the binary mixtures furfural+methyl isobutyl ketone, +2-butanol and +2-methyl-2-butanol', *Fluid Phase Equilibria*, 372, pp. 85–99. doi: 10.1016/j.fluid.2014.03.033.

