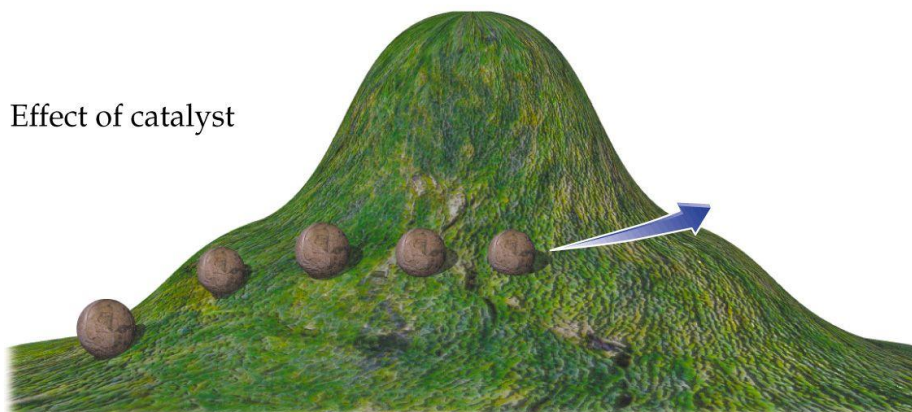
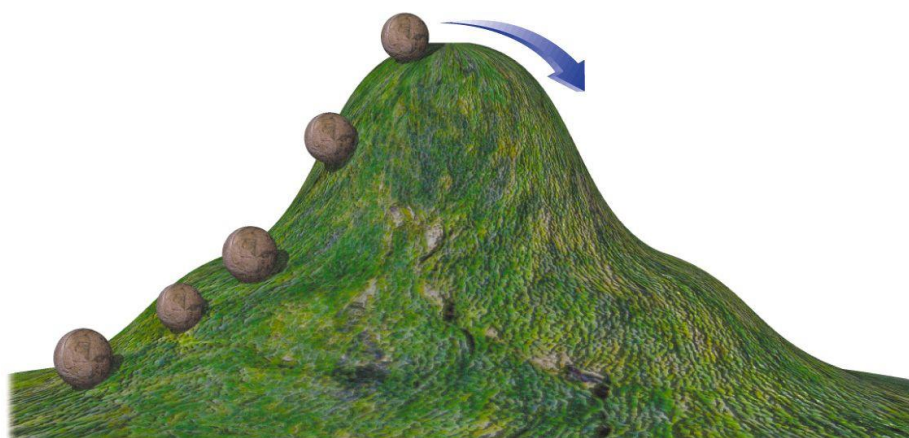


Activeringsenergie bepalen van een gekatalyseerde ontledingsreactie

Wat is de meest geschikte katalysator?



Naam:

In samenwerking met:

Werkgroep

-Naam partner:

-Naam partner:

Expertgroep

-Naam partner:

-Naam partner:

Inhoudsopgave

Introductie	3
Intentieverklaring	4
Les 1: voorbereiding	6
Les 2: Uitvoering praktisch onderzoek meten activeringsenergie	11
Les 3: Verwerken resultaten en opstellen adviesrapport	15
Bijlage A: Biokatalyse uitgelicht	19
Bijlage B: Heterogene katalyse uitgelicht	22
Bijlage C: Homogene katalyse uitgelicht	24
Bijlage D: Afleiding van de activeringsenergie uit de Arrhenius-vergelijking	27

Colofon

Deze lesmodule '*Activeringsenergie bepalen van een gekatalyseerde ontledingsreactie*' is bestemd voor de lessen scheikunde, 5 VWO en fungeert tevens als onderzoeksmethode voor didactisch onderzoek omtrent het onderwerp katalyse.

Deze lesmodule is samengesteld door:

- Freudenthal Instituut/Sectie Chemiedidactiek
 - Laurens Atteveld
 - Gjalt Prins

Gebaseerd op de lesbrief '*Katalyse: kernbegrip in de chemie*', ontwikkeld door:

- Zernike College
 - Ton Bominaar
- Freudenthal Instituut/Sectie Chemiedidactiek
 - Gjalt Prins
 - Maaïke Pol



Voor deze lesmodule geldt een Creative Commons Naamsvermelding-Niet-commercieel-Gelijk delen 3.0 Nederland Licentie

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/nl>

Het auteursrecht op deze lesbrief berust bij de Universiteit Utrecht, het Freudenthal Instituut voor Didactiek van Wiskunde en Natuurwetenschappen.

De auteurs hebben bij de ontwikkeling van dit materiaal gebruik gemaakt van materiaal van derden. Waar dat is gebeurd, is zo veel mogelijk de bron vermeld. De lesbrief is met zorg samengesteld. De Universiteit Utrecht aanvaardt geen enkele aansprakelijkheid voor enige schade voortkomend uit (het gebruik van) deze lesbrief.

Aangepaste versies van deze lesbrief mogen alleen verspreid worden, indien in de lesbrief vermeldt wordt dat het een aangepaste versie betreft, onder vermelding van de naam van de auteur(s) van de wijzigingen.

Introductie

Gedurende dit experiment, welke drie lessen zal duren, stap je in de rol van wetenschapper op een 'Research and Development' afdeling van een chemisch bedrijf. Dit bedrijf voert de ontledingsreactie van waterstofperoxide (H_2O_2) uit op grote schaal. Hoewel deze ontleding exotherm is en er dus gedurende de reactie energie vrijkomt, wil het bedrijf toch proberen om de reactie sneller en energiezuiniger te laten verlopen, ze hebben jouw afdeling daarom gevraagd om een advies op te stellen wat de meest geschikte katalysator voor deze reactie is. Voor het advies zijn zowel inhoudelijke als economische argumenten van belang.

Planning en groepsindeling

Dit experiment bestaat uit drie lessen. Tijdens de eerste les krijg je uitleg over het onderwerp katalyse en over de theorie van het onderzoek. Ook bereid je tijdens deze les het onderzoek voor. Je doet dit in een groep van maximaal 3 leerlingen. Na elke les worden een aantal vragen gesteld, die je op papier beantwoordt. Het is van belang dat iedereen zijn/haar eigen antwoorden noteert, omdat de groepsindeling iedere les anders zal zijn. Wanneer je alle vragen hebt beantwoord laat je deze aftekenen door je docent, lukt het niet om de vragen tijdens de les af te ronden, dan maak je deze als huiswerk voor de volgende les. Let op: Je mag alleen beginnen aan de tweede les als de vragen uit de eerste les zijn afgetekend door je docent.

In de tweede les wordt je groep opgesplitst. Ieder groepslid voert één van de drie delen van het onderzoek uit, je doet dit wel samen met andere leerlingen die hetzelfde onderdeel onderzoeken. Wanneer je alle vragen hebt beantwoord laat je deze aftekenen door je docent, lukt het niet om de vragen tijdens de les af te ronden, dan maak je deze als huiswerk voor de volgende les. Let op: Je mag alleen beginnen aan de derde les als de vragen uit de tweede les zijn afgetekend door je docent.

In de derde les werk je samen weer samen met dezelfde groep als in de eerste les. Tijdens deze les werk je jouw resultaten van het onderzoek uit, vergelijk je deze met de resultaten van je groepsgenoten, en trek je daaruit jullie conclusie.

Onderzoek

Met dit practicum kan je, los van je eigen onderzoek, ook deelnemen aan een onderzoek waarin wordt onderzocht of en hoe het onderwerp katalyse geïmplementeerd kan worden in het scheikundeonderwijs van de toekomst. Uiteraard doe je alleen mee als je dat zelf wilt, zie voor meer informatie instemmingsverklaring op de volgende pagina.

Intentieverklaring

Beste leerling,

Mijn naam is Laurens Atteveld en ik zou je graag uitnodigen deel te nemen aan mijn afstudeeronderzoek. Dit onderzoek is gericht op het onderwerp katalyse, een onderwerp dat erg groot is in de chemische industrie, maar waar op het voortgezet onderwijs erg minimaal les over wordt gegeven. Tijdens dit onderzoek wordt gekeken naar de effectiviteit van de nieuwe lesstof.

Wat wordt er van je verwacht?

Je bent minimaal 16 jaar oud en volgt lessen in 5 VWO. Gedurende de drie lessen dat het onderzoek in beslag neemt ben je aanwezig en toon je een goede inzet. Dit betekent ook dat je voorafgaand aan iedere les het voorbereidende huiswerk maakt en dat je alle vragen naar eigen kunnen hebt beantwoord. Deze vragen worden aan het einde van het project ingenomen en anoniem verwerkt. Tijdens de laatste les worden er, wanneer de opdracht is afgerond, nog enkele afrondende vragen gesteld. Dit korte interview wordt opgenomen.

Waar kan jij op rekenen?

Je leert in meer detail wat een katalysator nu eigenlijk precies is. Ook leer je enkele nieuwe begrippen die met het onderwerp te maken hebben. Het onderzoek bevat daarnaast een praktisch gedeelte waar je jouw praktische (onderzoeks)vaardigheden verder kunt ontwikkelen. Het practicum is nauw verwant aan de lesstof uit hoofdstuk 15.3, de geleerde stof kun je dus direct toepassen bij het aankomende schoolexamen. Natuurlijk zal er als dank voor je deelname ook gezorgd worden voor een kleine traktatie.

Data verwerving en opslag

Gedurende de lessen word je naam gebruikt om overzicht van de groepsindeling van het practicum te kunnen bewaren. Jouw antwoorden op de vragen in het werkblad worden verzameld als onderzoeksgegevens. Ook worden er audiofragmenten verzameld van het afsluitende interview. De werkbladen worden binnen een maand gedigitaliseerd, waarbij persoonlijke gegevens worden gescheiden van alle onderzoeksgegevens. De audiofragmenten van het afsluitende interview worden tijdelijk opgeslagen op een veilige server via SURFfilesender, deze zullen binnen een maand anoniem worden getranscribeerd. De fragmenten worden, net als de werkbladen, na verwerking direct vernietigd. De uiteindelijke onderzoeksgegevens worden voor tien jaar bewaard op een beveiligde server. In het verdere vervolg van het onderzoek is het niet meer mogelijk om via de onderzoeksgegevens een verband te leggen naar persoonlijke gegevens.

Toestemming

Voordat je kan deelnemen aan het onderzoek, heb ik jouw toestemming nodig. Deze toestemming wordt schriftelijk verzameld door het formulier op de volgende pagina te ondertekenen. Omdat deelname aan het onderzoek vrijwillig is, mag je je toestemming op ieder moment, zonder reden, intrekken. Voor meer informatie over het onderzoek kan je mailen naar:

l.j.c.atteveld@students.uu.nl.

Ik dank je hartelijk voor je aandacht en hoop dat ik je via deze weg voldoende geïnformeerd heb over de strekking van het onderzoek. Daarnaast wil je op voorhand alvast hartelijk bedanken voor je eventuele deelname aan het onderzoek, jouw deelname is voor mij ontzettend waardevol.

Met vriendelijke groeten,
Laurens Atteveld

Geïnformeerde toestemming

Bedankt voor je interesse in mijn onderzoek naar de effectiviteit van nieuw lesmateriaal over het onderwerp katalyse. Met jouw toestemming, verklaar je het volgende:

1. Ik verklaar dat ik voldoende geïnformeerd ben over de achtergrond en de strekking van het onderzoek, zoals omschreven op de vorige pagina.
 2. Ik verklaar dat ik deel wil nemen aan dit onderzoek en behoud het recht om mijn deelname in te trekken zonder hiervoor een reden op te hoeven geven. Ik besef me dat mijn deelname aan het onderzoek ieder moment gestopt kan worden.
 3. Wanneer mijn onderzoeksresultaten worden verwerkt in wetenschappelijke publicaties, of op enig andere manier publiek worden gemaakt, is dit compleet anoniem. Mijn persoonlijke data wordt niet verstrekt aan derden zonder mijn expliciete toestemming.
 4. Wanneer ik behoefte heb aan meer informatie over het onderzoek, nu of in de toekomst. Kan ik terecht bij Gjalt Prins. In het geval van klachten kan ik terecht bij de verantwoordelijke voor het onderzoek Gjalt Prins (g.t.prins@uu.nl) of bij de functionaris voor persoonsgegevens (privacy@uu.nl).
- Ik ben 16 jaar of ouder en geef toestemming voor mijn deelname aan het onderzoek.
 - Ik ben 16 jaar of ouder en geef geen toestemming voor mijn deelname aan het onderzoek.

Datum:

Handtekening:

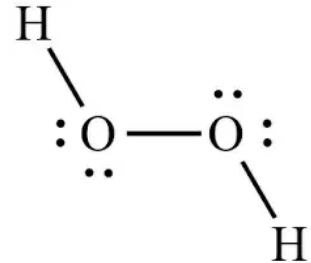
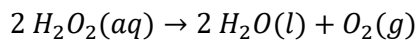
Introductie

Waterstofperoxide is een bekend product met een reeks van toepassingen. Het bestaat uit de elementen zuurstof en waterstof. Waterstofperoxide komt van nature in zeer lage concentraties in het milieu voor. Gasvormig waterstofperoxide is een van de producten van fotochemische reacties in de laagste lagen van de atmosfeer rondom de aarde. Het komt ook voor in water. In oppervlaktewater zijn concentraties van 51-231 mg/L gevonden.

Waterstofperoxide heeft de chemische formule H_2O_2 en structuurformule

H-O-O-H (zie Figuur 1). Het waterstofperoxide molecuul heeft één zuurstofatoom meer dan het veel stabielere watermolecuul. De binding tussen de twee zuurstofatomen, de zogenaamde peroxidebinding, laat relatief makkelijk los, onder vorming van twee H-O radicalen. Doordat deze radicalen makkelijk reageren met andere stoffen onder vorming van nieuwe radicalen, en zo een soort kettingreactie kunnen ontketenen, is een oplossing van waterstofperoxide uiterst reactief.

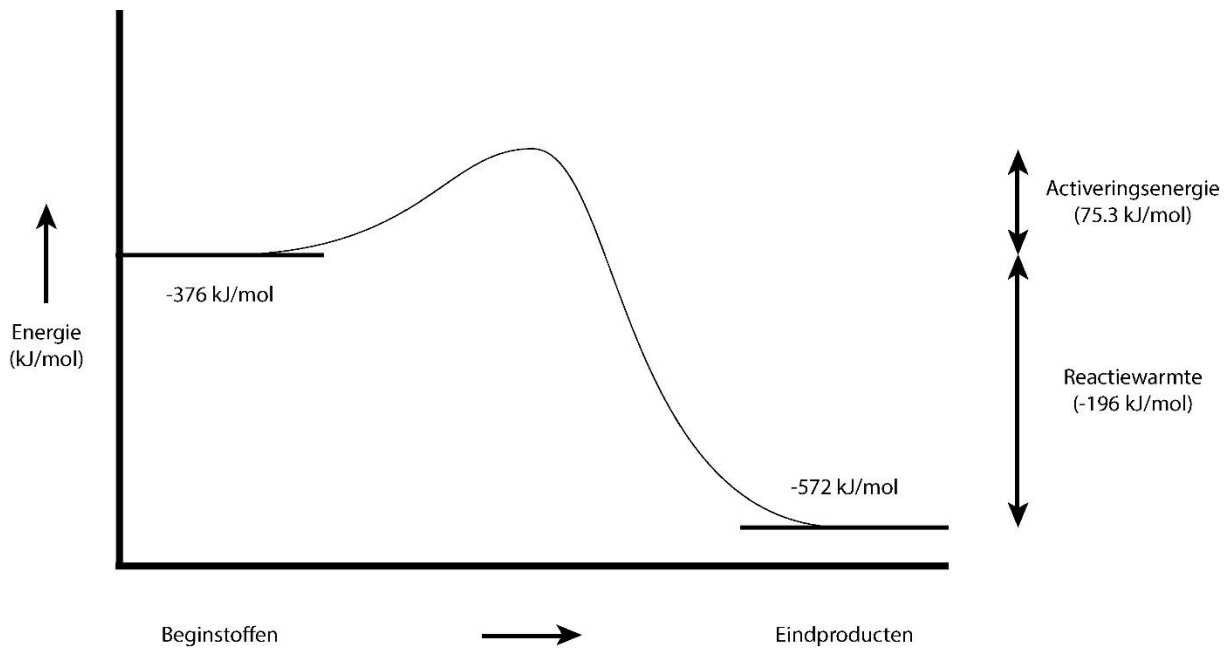
Waterstofperoxide is niet stabiel en valt uiteen in water (H_2O) en zuurstof (O_2). Alhoewel de 'chemical drive' van deze reactie positief is, verloopt de ontleding bij kamertemperatuur zeer (onmeetbaar) traag. De reactievergelijking is als volgt:



Figuur 1:
Lewisstructuur van
waterstofperoxide.

De reactie kan worden gekatalyseerd door aanwezigheid van jodide-ionen ($I^- (aq)$), ijzer-ionen ($Fe^{3+} (aq)$), bruinsteen ($MnO_2 (s)$) of het enzym katalase. Enkele thermodynamische gegevens over de ontleding van waterstofperoxide staan hieronder weergegeven, deze gegevens vormen ook de basis van het onderstaande energiediagram (Figuur 2):

Stof	Vormingsenthalpie ΔH^0 ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ bij $T=298\text{ K}$ en $p=100\text{ kPa}$)
$\text{H}_2\text{O}_2 (aq)$	-188
$\text{H}_2\text{O} (l)$	-286
$\text{O}_2 (g)$	0



Figuur 2: Energiediagram voor de ontleding van waterstofperoxide.

Het doel van dit onderzoek is om te bepalen of bovenstaande katalysatoren geschikt zijn om de ontleding van waterstofperoxide op grote schaal te katalyseren. En zo ja, welke katalysator dan het meest geschikt. Hiervoor kunnen meerdere factoren een rol spelen. Denk hierbij niet alleen aan de activatie-energie van de gekatalyseerde reactie, de stabiliteit van de katalysator en het gemak waarmee deze kan worden teruggewonnen; maar zeker ook aan de veiligheid en beschikbaarheid van de katalysator. De activatie-energie van de hierboven genoemde katalysatoren zal je in samenwerking met je groepsgenoten experimenteel gaan bepalen. Voor de andere aspecten wordt gebruik gemaakt van gegevens op het internet gecombineerd met observaties uit het experiment.

Voorbereiding praktisch onderzoek

Verdeel je groep over drie van de vier verschillende katalysatoren. Vul deze indeling hieronder in. Lees vervolgens de volgende informatie door en vul deze aan waar nodig.

katalase (uit aardappelrasp)	MnO ₂ (bruinsteen)	I ⁻ (uit kaliumjodide)	Fe ³⁺ (uit ijzer(III) nitraat nonahydraat)

Onderzoeksvraag

Wat is de activeringsenergie van de gekatalyseerde ontleding van waterstofperoxide?

Materialen

Voor dit practicum heb je de volgende materialen nodig:

- | | |
|----------------------------------|---|
| - Erlenmeyer van 100 mL | - Roervlo |
| - Parafilm (als deksel) | - Stopwatch |
| - Aluminiumfolie (voor isolatie) | - 10% H ₂ O ₂ -oplossing |
| - Watten (voor isolatie) | - Fe(NO ₃) ₃ •9H ₂ O of KI of MnO ₂ of katalase uit aardappelrasp (op bureau docent) |
| - Digitale thermometer | - Weegschaal (op bureau docent) |
| - Maatcilinder 25 mL | - Laptop met Excel |
| - Spateltje | - Binas |
| - Statief | |
| - Magneetroerder | |

Veiligheid en milieu

Waterstofperoxide:

- I. Giftig bij inademen van gas, damp of stof
- II. Grenswaarde 1,4 mg·m⁻³ (over een tijdgewogen gemiddelde van 8 uur)
- IV. Giftig bij inwendig gebruik
- V. Gevaarlijk voor huid en ogen
- VI. Brand- en/of explosiegevaar
- VII. Explosiegevaar
- VIII. Eerste hulp:

In geval van inademen: halfzittende houding laten innemen; arts waarschuwen

In geval van inslikken: veel water laten drinken; halfzittende houding laten innemen

Bij contact met huid/ogen: verontreinigde kleren uittrekken; douchen; arts waarschuwen

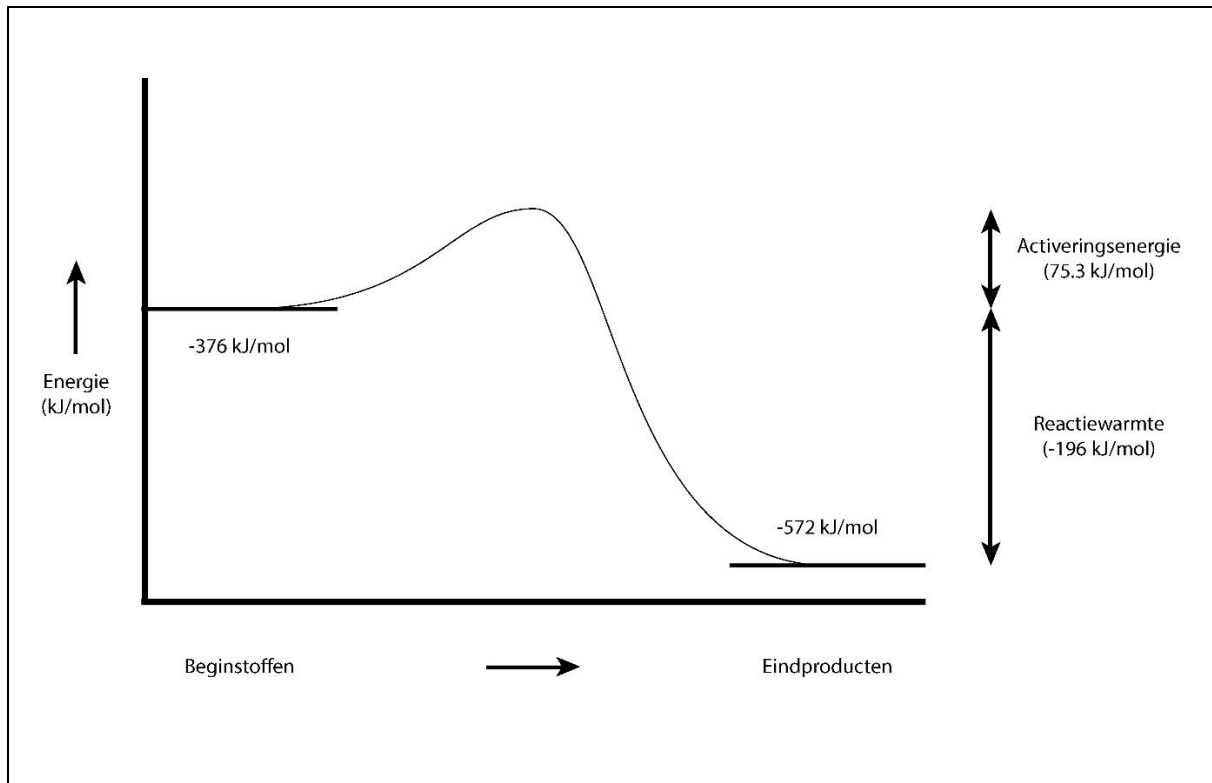
IX: Bijzonderheden: explosief door verhitten, licht of katalysatoren, in donker bewaren

Vul de veiligheidsinformatie voor jouw katalysator zelf in. Maak hierbij gebruik van Binas tabel 97 of zoek op internet met de zoekterm 'veiligheidsinformatieblad' gevolgd door je katalysator.

--

Vragen les 1

1.1) Onderstaand energiediagram geldt voor de ongekatalyseerde reactie, teken in dit energiediagram hoe het energiediagram van de gekatalyseerde reactie weergegeven zou moeten worden. Denk hierbij aan het aantal stappen in het mechanisme en de hoogte van de activeringsenergie. Gebruik voor het opstellen van je antwoord bijlage 1, 2 of 3.



1.2) Zoek op internet uit wat het begrip denatureren betekent en leg uit of dit fenomeen voor jouw katalysator van belang zou kunnen zijn. Gebruik voor het opstellen van je antwoord bijlage 1, 2 of 3.

1.3) Tijdens de introductie heb je kennis gemaakt met de begrippen homogeen en heterogeen. Leg in je eigen woorden uit wat homogene en heterogene katalysatoren zijn en geef aan tot welke categorie de eerdergenoemde katalysatoren behoren. Gebruik voor het opstellen van je antwoord bijlage 1, 2 of 3.

1.4) Leg op basis van de veiligheidsinformatie van jouw katalysator uit of dit een veilige stof is of niet?

1.5) Zoek uit voor welke prijs jouw katalysator verkocht wordt, dit kan bijvoorbeeld via de volgende site: sigmaaldrich.com.

1.6) Tijdens de uitvoering in de volgende les moet je 1,5 mmol van je katalysator ongeveer nauwkeurig afwegen, bereken hiervoor alvast hoeveel gram dat moet zijn (indien je katalase hebt gekozen als katalysator kan je deze vraag niet beantwoorden, omdat de hoeveelheid katalase-enzymen in aardappel onbekend is).

Demonstratie door docent

- Voordat we de daadwerkelijke meting gaan doen, ga je eerst bekijken wat voor effect het toevoegen van de katalysator zal hebben op het waterstofperoxide. Hiervoor vult je docent een reageerbuisje met ongeveer 5 mL 10 % H₂O₂ en voegt hier een spatelpuntje van een katalysator aan toe, schrijf hieronder je waarnemingen op.
- Zodra de reactie afgelopen lijkt te zijn, wordt er nogmaals 5 mL 10% H₂O₂ toe aan de oplossing, schrijf hieronder je waarnemingen op.

Praktische uitvoering

- Tijd om de daadwerkelijke meting uit te voeren. Isoleer eerst de erlenmeyer. Eerst aluminiumfolie, dan een laagje watten en tenslotte weer aluminiumfolie. Let op dat de isolatie aan de onderkant vlak is en niet te dik (de magneetroerder moet blijven werken). Zet de ingepakte erlenmeyer vast aan het statief, zodat deze niet meer om kan vallen.
- Meet 20 mL 10% H₂O₂-oplossing af met een maatcilinder en breng dit over in de erlenmeyer, schrijf op de volgende pagina op hoe de 10% H₂O₂-oplossing eruit ziet en hoe je deze hebt afgemeten.
- Bereken de massa van 1,5 mmol van je katalysator en weeg dit ongeveer nauwkeurig af, schrijf op hoe de katalysator eruit ziet. Let op: Je kan van katalase de massa niet uitrekenen, omdat de hoeveelheid enzymen in aardappel onbekend is. Weeg in plaats daarvan 3 g aardappelrasp af.
- Doe de vlo in de erlenmeyer en zet de erlenmeyer op de magneetroerder. Dek de erlenmeyer af met het parafilm en prik de thermometer door het parafilm heen.
- Controleer of de tip van de digitale thermometer in de vloeistof 'hangt' maar de vlo niet hindert in de draaibeweging.
- Laat de oplossing even rustig roeren en meet de begintemperatuur T₀ als deze stabiel is.
- **Let op: deze stap moet snel verlopen, verdeel de taken dus goed!** Voeg de katalysator aan de oplossing in de erlenmeyer toe. Start tegelijkertijd de stopwatch. Dek daarna de erlenmeyer opnieuw af met de parafilm en plaats deze (als dat niet al het geval is) op de roerplaat.
- Lees elke 10 seconden de temperatuur af totdat de temperatuur niet meer stijgt (einde van de reactie). Noteer deze gegevens op de volgende pagina. De meting duurt maximaal 10 minuten, noteer ook eventuele bijzonderheden in je waarnemingen.
- Giet nu de inhoud van het bekeerglas over in je afval-bekerglas (let op dat je de roervlo niet weggooit), en spoel al je gebruikte glaswerk even na voordat je het inlevert. Schrijf op hoe het uiteindelijke mengsel eruit ziet.
- Als er nog voldoende tijd beschikbaar is, mag je het experiment herhalen zodat je resultaten meer betrouwbaar worden.
- Zet als alles is opgeruimd je resultaten alvast in Excel en geef antwoord op de vragen van les 2.

Waarnemingen meting 1:

--

Resultaten meting 1:

Noteer de temperatuur iedere 10 seconden totdat de temperatuur stopt met stijgen.

Tijd (seconden)	Temperatuur (°C)	Tijd (seconden)	Temperatuur (°C)	Tijd (seconden)	Temperatuur (°C)
0		210		420	
10		220		430	
20		230		440	
30		240		450	
40		250		460	
50		260		470	
60		270		480	
70		280		490	
80		290		500	
90		300		510	
100		310		520	
110		320		530	
120		330		540	
130		340		550	
140		350		560	
150		360		570	
160		370		580	
170		380		590	
180		390		600	
190		400		610	
200		410		Maximale meettijd behaald	

Waarnemingen meting 2:

--

Resultaten meting 2:

Noteer de temperatuur iedere 10 seconden totdat de temperatuur stopt met stijgen.

Tijd (seconden)	Temperatuur (°C)	Tijd (seconden)	Temperatuur (°C)	Tijd (seconden)	Temperatuur (°C)
0		210		420	
10		220		430	
20		230		440	
30		240		450	
40		250		460	
50		260		470	
60		270		480	
70		280		490	
80		290		500	
90		300		510	
100		310		520	
110		320		530	
120		330		540	
130		340		550	
140		350		560	
150		360		570	
160		370		580	
170		380		590	
180		390		600	
190		400		610	
200		410		Maximale meettijd behaald	

Vragen les 2

2.1) Kan je, voordat je de resultaten gaat uitwerken, op basis van je waarnemingen al een uitspraak doen over wat een logische waarde van de activeringsenergie van de gekatalyseerde reactie zou moeten zijn ten opzichte van de ongekatalyseerde reactie? Leg je antwoord uit.

2.2) Leg uit of alle waterstofperoxide na het experiment is ontleedt, en leg uit hoe je dat zou kunnen aantonen. Leg daarnaast uit waarom de gebruikte katalysator wel of niet na deze reactie nog bruikbaar zou kunnen zijn om in te zetten bij een volgende reactie.

2.3) Zou je de gebruikte katalysator weer zuiver terug kunnen winnen? Indien dit kan, omschrijf hiervoor een mogelijke aanpak. Indien dit niet kan, leg uit waarom niet.

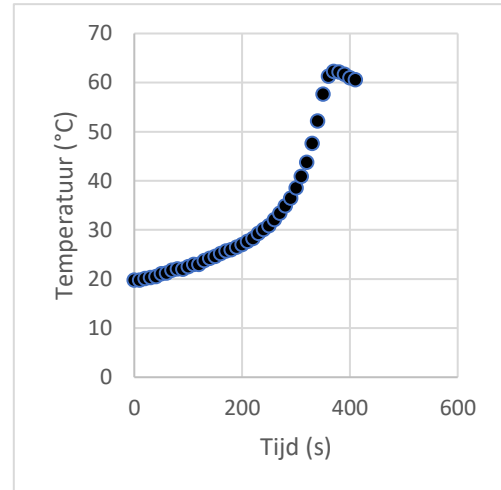
2.4) Zou het milieutechnisch/veiligheidshalve noodzakelijk zijn om je gebruikte katalysator te scheiden van de eindproducten?

2.5) Zou het economisch rendabel zijn om de katalysator terug te winnen?

Verwerken van de resultaten

- Tijdens de vorige les heb je gedurende een bepaalde tijd de temperatuur van de reactie bijgehouden. Deze gegevens staan als het goed is al in Excel. Voor de verwerking van de gegevens hebben we alleen de gegevens nodig gedurende de tijdstippen dat er een duidelijke stijging van de temperatuur heeft plaatsgevonden. Alle gegevens voorafgaand aan deze temperatuurstijging en nadat de maximale temperatuur is bereikt mogen buiten beschouwing worden gelaten.

- Zet nu in Excel de gemeten waardes uit in een grafiek van temperatuur (in °C) tegen de tijd (in s). De grafiek zal ongeveer de volgende vorm moeten hebben (zie plot rechts).



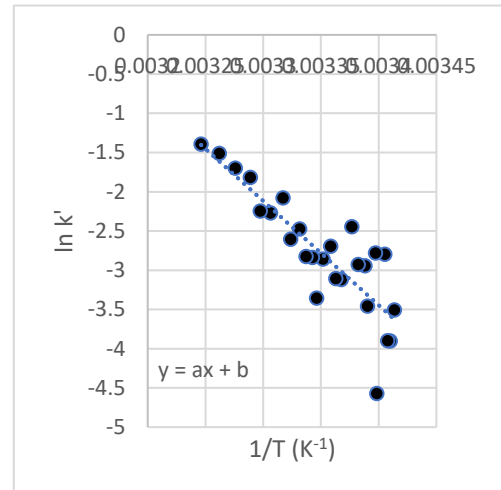
- Benader nu in Excel de helling op verschillende punten in de grafiek. Bereken door middel van deze helling de reactiesnelheidsconstante ($k'(T)$) bij die temperatuur, gebruik voor je berekeningen onderstaande formules:

$$(\text{helling})_T = \frac{\Delta \text{temperatuur}}{\Delta \text{tijd}} = \frac{T_2 - T_1}{t_2 - t_1}$$

$$k'(T) = (\text{helling})_T \cdot \frac{T_{\text{eind}} - T_{\text{begin}}}{T_{\text{eind}} - T}$$

- Bereken vervolgens in Excel, $\ln k'$ en $1/T$. Houd rekening dat de eenheid van $1/T$ vanaf nu uitgedrukt moet worden in K^{-1} en dus niet meer in $^{\circ}\text{C}^{-1}$, zodat we de berekende waarden van $k'(T)$ in kunnen vullen in de Arrhenius vergelijking (zie bijlage D voor de volledige afleiding).

- Zet nu in Excel de gemeten waardes uit in een grafiek van $\ln k'$ tegen $1/T$ (in K^{-1}). De grafiek zal ongeveer de volgende vorm moeten hebben (zie plot rechts).



- Bepaal vervolgens in Excel de richtingscoëfficiënt van de grafiek door een trendlijn te fitten door de gegevens. De vergelijking van deze trendlijn zal lijken op de onderstaande formule en Excel vult hier de waarden voor a en b in. De richtingscoëfficiënt is gelijk aan de waarde van a en heeft hoogstwaarschijnlijk een negatieve waarde.

$$y = ax + b$$

- Bereken de activeringsenergie door de waarde van de richtingscoëfficiënt te vermenigvuldigen met de waarde van gasconstante R (Binas tabel 7A).

Katalysator	Experimenteel bepaalde activeringsenergie (in J mol^{-1})
Katalase	
MnO_2	
I^-	
Fe^{3+}	

Discussie

Nu is het tijd om jullie resultaten te interpreteren/bediscussiëren. Noteer voor elk van de volgende aspecten de resultaten van de bio/homogene/heterogene katalysator, en omschrijf per aspect de voor- en nadelen wat betreft elke katalysator.

Experimenteel bepaalde waarden activeringsenergie

Katalysator	Activeringsenergie (in J mol ⁻¹)
Katalase	
MnO ₂	
I ⁻	
Fe ³⁺	

3.1) Welke katalysator is volgens dit aspect de meest geschikte katalysator en wat zijn de voor- en nadelen van deze katalysator ten opzichte van de andere katalysatoren? Vergelijk voor het beantwoorden van deze vraag jouw antwoord op vraag 1.1 en 2.1 met die van je groepsgenoten.

--

Experimenteel vastgestelde waarnemingen omtrent de stabiliteit

Katalysator	Waarnemingen omtrent de stabiliteit
Katalase	
MnO ₂	
I ⁻	
Fe ³⁺	

3.2) Welke katalysator is volgens dit aspect de meest geschikte katalysator en wat zijn de voor- en nadelen van deze katalysator ten opzichte van de andere katalysatoren? Vergelijk voor het beantwoorden van deze vraag jouw antwoord op vraag 1.2 en 2.2 met die van je groepsgenoten.

--

Het gemak waarmee de katalysator (zuiver) kan worden teruggewonnen

Katalysator	Gemak waarmee de katalysator kan worden teruggewonnen
Katalase	
MnO ₂	
I ⁻	
Fe ³⁺	

3.3) Welke katalysator is volgens dit aspect de meest geschikte katalysator en wat zijn de voor- en nadelen van deze katalysator ten opzichte van de andere katalysatoren? Vergelijk voor het beantwoorden van deze vraag jouw antwoord op vraag 1.3 en 2.3 met die van je groepsgenoten.

--

Veiligheidsaspecten

Katalysator	Veiligheidsaspecten
Katalase	
MnO ₂	
I ⁻	
Fe ³⁺	

3.4) Welke katalysator is volgens dit aspect de meest geschikte katalysator en wat zijn de voor- en nadelen van deze katalysator ten opzichte van de andere katalysatoren? Vergelijk voor het beantwoorden van deze vraag jouw antwoord op vraag 1.4 en 2.4 met die van je groepsgenoten.

--

Beschikbaarheid

Katalysator	Beschikbaarheid
Katalase	
MnO ₂	
I ⁻	
Fe ³⁺	

3.5) Welke katalysator is volgens dit aspect de meest geschikte katalysator en wat zijn de voor- en nadelen van deze katalysator ten opzichte van de andere katalysatoren? Vergelijk voor het beantwoorden van deze vraag jouw antwoord op vraag 1.5 en 2.5 met die van je groepsgenoten.

--

Conclusie

Schrijf tot slot het adviesrapport. Vul hiervoor de onderstaande teksten aan. Uiteraard mag je ook adviseren dat één of meerdere katalysatoren in jullie ogen afgeraden worden om te gebruiken.

Het doel van dit onderzoek was het schrijven van een advies over welke katalysator geschikt is om op grote schaal te gebruiken bij de ontleding van waterstofperoxide. Op basis van het onderzoek adviseren wij de volgende katalysator(en) (aanvinken wat van toepassing is:

- | | |
|---|---|
| <input type="checkbox"/> Katalase | <input type="checkbox"/> Fe ³⁺ |
| <input type="checkbox"/> MnO ₂ | <input type="checkbox"/> Geen van de opties |
| <input type="checkbox"/> I ⁻ | <input type="checkbox"/> Anders, namelijk: |

- Ons belangrijkste gegeven die dit advies kracht bijzet is gebaseerd op het volgende gegeven:

Deze data onderbouwt onze conclusie als volgt:

Hierbij is rekening gehouden met de volgende (ongetoetse) aanname:

We kunnen met zekerheid stellen dat deze onderbouwing geldig is, omdat:

- Ons tweede argument die dit advies kracht bijzet is gebaseerd op de volgende data:

Deze data onderbouwt onze conclusie als volgt:

Hierbij is rekening gehouden met de volgende (ongetoetse) aanname:

We kunnen met zekerheid stellen dat deze onderbouwing geldig is, omdat:

- Ons derde argument die dit advies kracht bijzet is gebaseerd op de volgende data:

Deze data onderbouwt onze conclusie als volgt:

We kunnen met zekerheid stellen dat deze onderbouwing geldig is, omdat:

Hierbij is rekening gehouden met de volgende (ongetoetse) aanname:

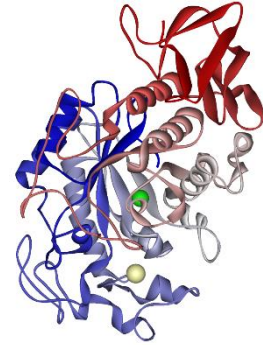
Enkele randvoorwaarden waar bij dit advies rekening mee gehouden dient te worden zijn:

Katalyse algemeen

Een katalysator versnelt een reactie door de activeringsenergie te verlagen. Dat betekent dat er ook daadwerkelijk een ander reactiemechanisme moet plaatsvinden, omdat er een andere overgangstoestand moet zijn, met een lager energieniveau. In de praktijk neemt een katalysator dan ook altijd op de een of andere manier deel aan de reactie, maar wordt hij aan het eind van de reactie steeds weer terug gevormd.

Biokatalyse

Een enzym is een eiwit dat als biokatalysator een bepaalde reactie in een organisme mogelijk maakt of een reactie versnelt. De stof waar het enzym op inwerkt heet het substraat. Enzymen zitten in voedsel of worden in organismen zelf gemaakt. Een voorbeeld is amylase dat amylose (onvertakt zetmeel) afbreekt, zie Figuur 3.



Figuur 3: Een model van amylase.

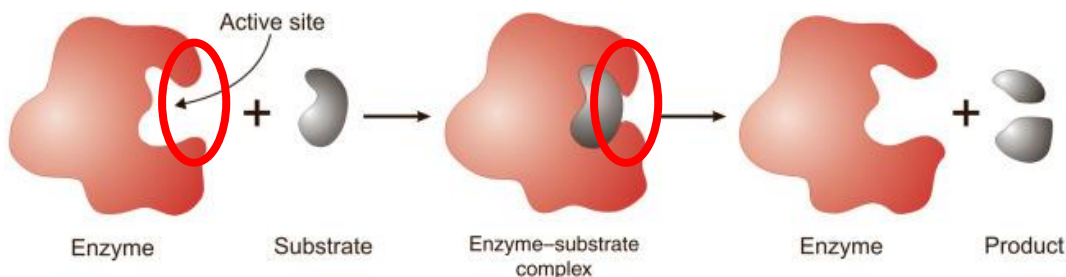
In de zesde klas leer je dat enzymen een primaire, secundaire en tertiaire structuur bevatten. In het kort is de primaire structuur van een eiwitmolecuul het aantal, type en volgorde van aminozuureenheden (aminozuren mag je voor nu even beschouwen als monomeren. De secundaire structuur van een eiwitmolecuul is de vorming van een α -helix, een spiraalstructuur, of een β -sheet, een plaatstructuur. De verschillende zijgroepen van alle aminozuureenheden bepalen de ruimtelijke bouw van het eiwitmolecuul, de tertiaire structuur. Voor het functioneren van een enzym is het essentieel dat de tertiaire structuur van het eiwit in stand blijft. Wanneer deze tertiaire structuur namelijk verloren gaat, en het eiwit zich dus ontvouwd wordt het enzym onwerkzaam. Dit uitvouwen wordt ook wel denatureren genoemd.

Katalase als biokatalysator van de ontleding van waterstofperoxide

Het is moeilijk om over reactiemechanismen te spreken in het geval van eiwitten. Wel kan de werking van enzymen in het algemeen omschreven worden. Als een enzym een reactie katalyseert, hecht het zich aan het substraat. De plaats waar het substraat zich hecht is het actieve centrum van het enzym. In dit actieve centrum vindt de eigenlijke reactie plaats: het substraatmolecuul wordt omgezet in een nieuw molecuul. De enzymwerking bespreken we in drie stappen.

1. Binding van het substraat aan het enzym

Vrijwel alle enzymen hebben een specifieke werking. Dat wil zeggen dat ze alleen één bepaalde omzetting katalyseren. Daarnaast zijn ze ook selectief, want ze katalyseren maar voor één bepaalde molecuulsoort, het substraat. Dit houdt in dat een enzym een bepaalde molecuulsoort moet kunnen 'herkennen'. Dit herkennen is een kwestie van ruimtelijke bouw van het enzymmolecuul en de polariteit of lading van groepen bij het actieve centrum. Het actieve centrum is een 'holte', waarin het substraatmolecuul past, zie Figuur 4.

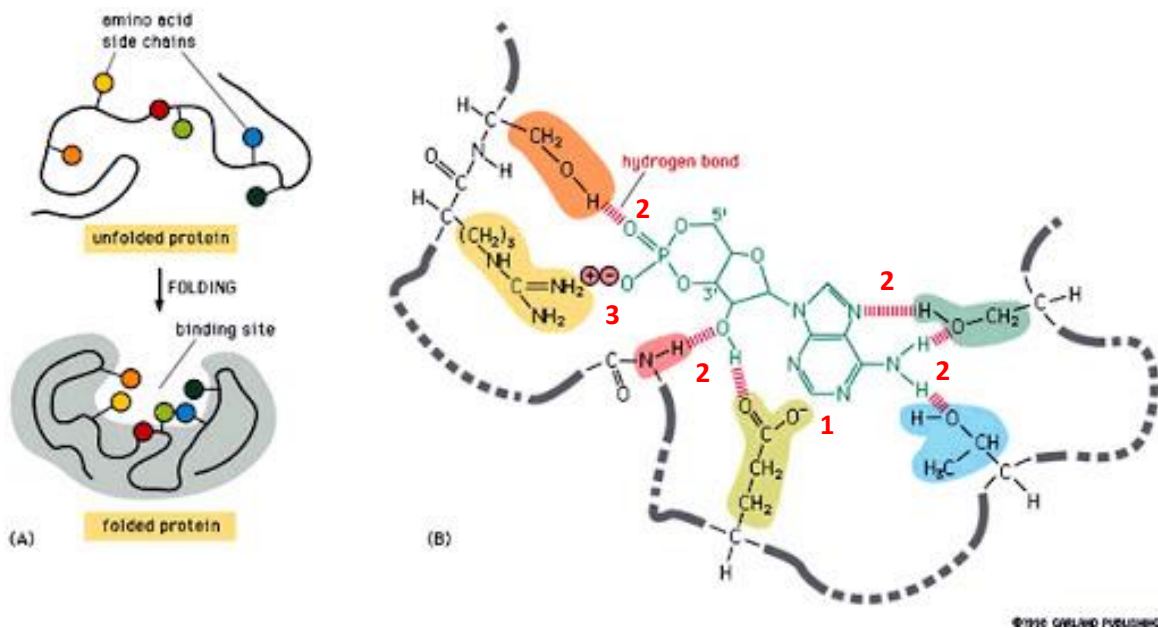


Figuur 4: Schematische voorstellen van een enzym gekatalyseerde reactie. Tijdens de vorming van een enzym-substraatcomplex verandert de ruimtelijke bouw van het enzym ook. Zie de rode cirkel in de figuur.

Er treedt een binding op tussen het enzym en het substraat. Zo ontstaat een enzym-substraatcomplex. Tijdens de vorming van het enzym-substraatcomplex verandert ook de ruimtelijke bouw van het enzym zelf, zie de omgeving van de rode cirkel in Figuur 4. Bij de bindingen tussen enzym en substraat kunnen de volgende bindingstypen een rol spelen:

- Vanderwaalsbinding;
- H-brug;
- ionbinding;
- atoombinding (bijvoorbeeld een zwavelbrug);

Van deze vier bindingstypen komt de atoombinding weinig voor. Een atoombinding is sterk, waardoor het verbreken ervan veel energie kost. In Figuur 5 zie je hoe drie van deze vier soorten bindingen in een eiwitmolecuul voor kunnen komen.



Figuur 5: Bindingen tussen enzym en substraat, (1) vanderwaalsbinding, (2) H-bruggen en (3) ionbinding.

2. De enzym-gekatalyseerde reactie

Na de vorming van het enzym-substraatcomplex vindt de reactie plaats. Bij chemische reacties moeten meestal atoombindingen verbroken worden en gevormd. Voor de snelheid waarmee dit gebeurt, is een aantal factoren van belang, onder andere de temperatuur, de pH, de enzymconcentratie en de activeringsenergie. De binding van het substraat aan het enzym wordt benut voor een gedeeltelijke verbreking (verzwakking) van een atoombinding. Je kunt ook zeggen: als het substraat aan het enzym bindt, vindt al een vervorming plaats in de richting van het reactieproduct. Ook daardoor zal de reactie worden versneld, omdat bij reacties het verbreken van atoombindingen de meeste energie kost. Als de atoombindingen zijn verbroken, verloopt de reactie verder, waarbij ook andere moleculen een rol kunnen spelen. Zo zijn bij enzymatische hydrolyse ook watermoleculen nodig.

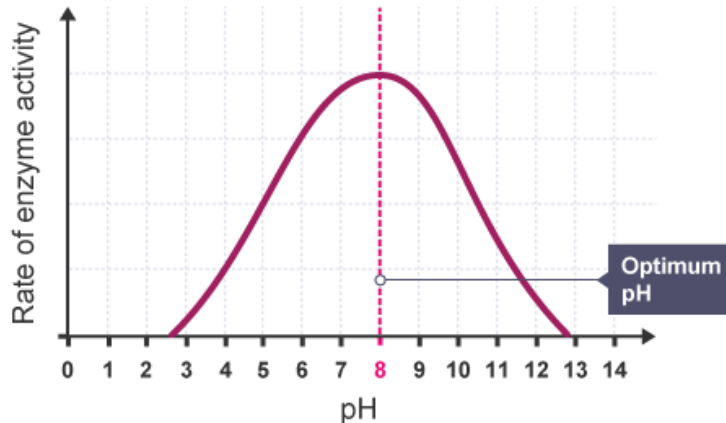
3. Afscheiding van de reactieproducten van het enzym

Zodra het substraat heeft gereageerd, laat het enzym de reactieproducten los. Het enzym keert daarbij terug naar zijn oorspronkelijke toestand en is klaar om het volgende substraatmolecuul op te nemen, zie Figuur 4.

Stabiliteit van een biokatalysator

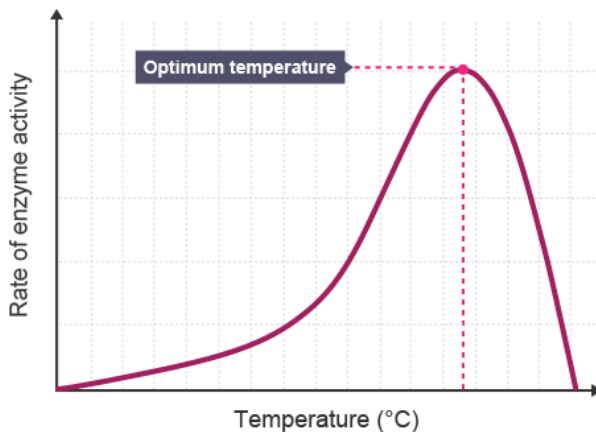
Vrijwel elk enzym heeft een pH-optimum: een pH-waarde waarbij de werkzaamheid maximaal is, zie Figuur 6. Het constant houden van de pH in het bloed door buffers is onder andere van belang voor de werkzaamheid van enzymen. Zowel bij verlaging als bij verhoging van de pH neemt de werkzaamheid af. Dit wordt veroorzaakt door zijgroepen in een enzym die een H^+ -ion kunnen opnemen of afstaan.

In een levend organisme is de pH binnen een bepaalde omgeving constant, maar kan van plaats tot plaats sterk verschillen, zoals in het spijsverteringskanaal. Spijsverteringsenzymen hebben daardoor zeer verschillende pH-optima.



Figuur 6: Een enzym werkt het beste wanneer de pH-waarde gelijk is aan het pH-optimum. Daalt of stijgt deze waarde teveel, dan verandert de structuur van de actieve plaats. Het enzym denatureert dan.

In warmbloedige organismen is een enzym werkzaam bij een constante temperatuur. In koudbloedige organismen en bij reacties buiten een levend organisme is dat niet het geval; daar speelt de factor temperatuur een belangrijke rol bij enzym-gecatalyseerde processen. Het diagram in Figuur 7 geeft aan hoe de snelheid van een enzymatische reactie afhangt van de temperatuur.



Figuur 7: Elk enzym heeft een specifieke temperatuur waarbij deze het beste werkt. Wordt de temperatuur te hoog, dan ontvouwt het enzym.

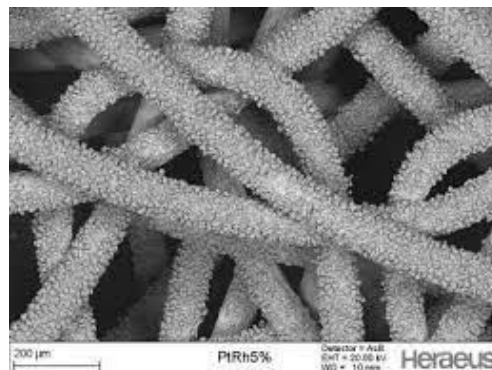
Bij lage temperatuur is het verloop exponentieel, in overeenstemming met de vuistregel dat de reactiesnelheid verdubbelt bij elke tien graden temperatuurstijging. Boven een bepaalde temperatuur treedt denaturering van het enzym op. Het enzymmolecuul verliest zijn tertiaire structuur en wordt onwerkzaam. Verhogen van de temperatuur is dus uiteindelijk desastreus voor het enzym, maar verlagen van de temperatuur heeft we invloed op de snelheid van de katalyse, maar geen invloed op de tertiaire structuur van het enzym.

Katalyse algemeen

Een katalysator versnelt een reactie door de activeringsenergie te verlagen. Dat betekent dat er ook daadwerkelijk een ander reactiemechanisme moet plaatsvinden, omdat er een andere overgangstoestand moet zijn, met een lager energieniveau. In de praktijk neemt een katalysator dan ook altijd op de een of andere manier deel aan de reactie, maar wordt hij aan het eind van de reactie steeds weer terug gevormd.

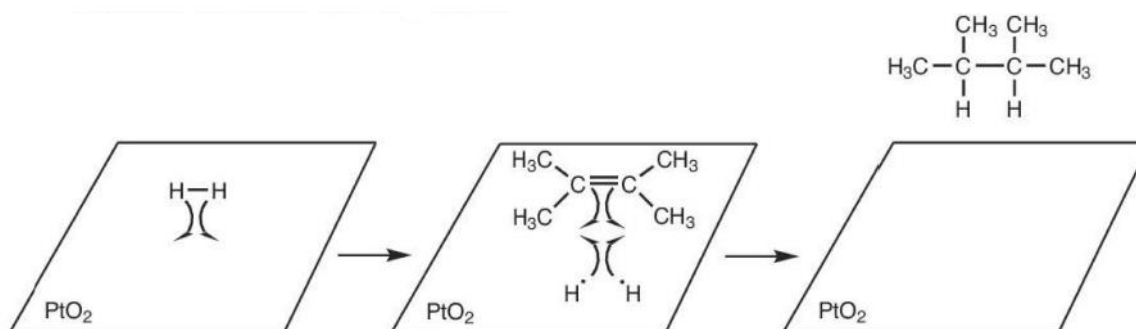
Heterogene katalyse

Metalen functioneren vaak als katalysatoren. Dat heeft te maken met het feit dat de valentie-elektronen in metalen minder sterk aan de atoomkern zijn gebonden en vrij kunnen bewegen. Metalen kunnen daardoor tijdelijk een elektron leveren dat nodig is voor een mechanisme, of tijdelijk een elektron opnemen. De stoffen die aan de gekatalyseerde reactie deelnemen, zijn vaak vloeistoffen of gassen. Omdat de katalysator zich in een andere fase bevindt dan de reagerende stoffen, vindt de katalyse aan het grensvlak plaats. Dit heet heterogene katalyse. Wanneer metalen als katalysator worden gebruikt, is dat meestal in de vorm van een poeder of gasachtig materiaal om het oppervlak waaraan kan worden gereageerd zo groot mogelijk te maken (Figuur 8). De reactiesnelheid wordt zo optimaal vergroot.



Figuur 8: microscopische opname van een gas van een platina-rhodiumkatalysator.

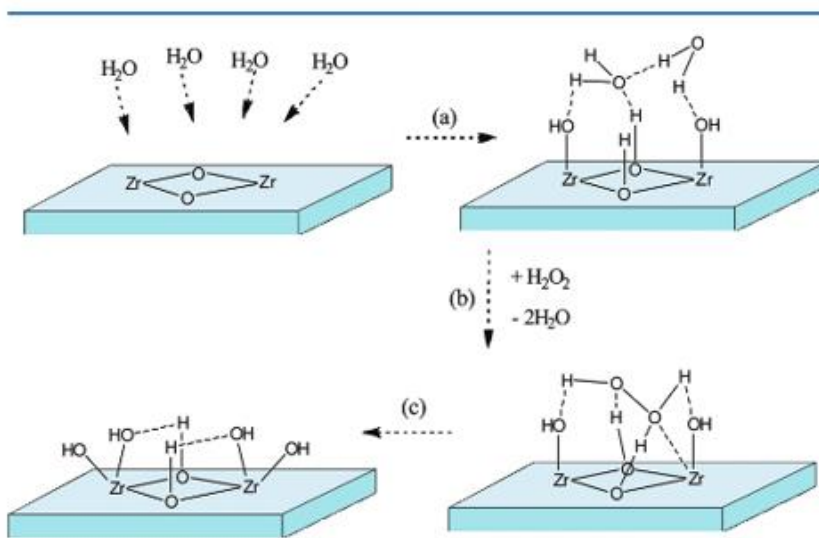
Een voorbeeld van een heterogeen gekatalyseerde reactie is de additie van waterstof aan 2,3-dimethylbut-2-een (Figuur 9). Eerst wordt waterstof gebonden als losse atomen aan het oppervlak van de platina katalysator. De reactieve waterstofradicalen reageren vervolgens met de dubbele binding van het alkeen. Zoals je kunt zien in Figuur 9 katalyseert platina ook prima als het zich in het zout PtO_2 bevindt.



Figuur 9: PtO_2 katalyseert de additie van waterstof aan 2,3-dimethylbut-2-een.

MnO₂ als heterogene katalysator voor de ontleding van waterstofperoxide

Het exacte werkingsmechanisme van bruinsteen is (nog) niet bekend. Er wordt aangenomen dat de ontledingsreactie plaatsvindt aan het oppervlakte. Er zijn veel experimenten gedaan naar de ontleding van waterstofperoxide op het oppervlak van metaal oxiden, zoals overgangsmetalen ZrO₂ en TiO₂. Aangezien MnO₂ ook tot de overgangsmetalen behoort, kan het mechanisme overeenkomsten bevatten. Echter condities als pH, type oxide en temperatuur kunnen leiden tot andere mechanismen. Het voorgestelde mechanisme van ZrO₂ is weergegeven in onderstaande Figuur 10. Eerst worden 4 watermoleculen gebonden, waarna (stap a) na heroriëntatie van bindingen twee watermoleculen loslaten en elke Zr een OH heeft gebonden en elke O een H. Vervolgens bindt een waterstofperoxide molecuul (Stap b). Vervolgens wordt de O-O binding in H₂O₂ verbroken (stap c). Aan elke Zr zijn dan twee OH's gebonden en elke O een H. Daarna volgt een serie (ketting)reacties, geïnitieerd door het ontstaan van OH radicalen (afkomstig van Zr) waarbij uiteindelijk water en zuurstofgas ontstaat.



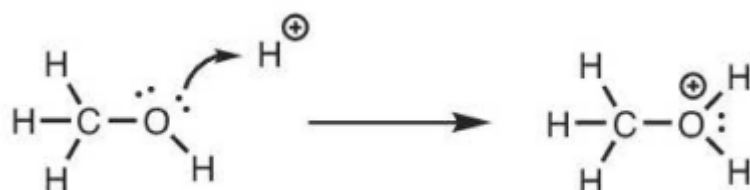
Figuur 10: Schematische weergave van voorgesteld mechanisme van ontleding van waterstofperoxide aan oppervlak van ZrO₂.

Katalyse algemeen

Een katalysator versnelt een reactie door de activeringsenergie te verlagen. Dat betekent dat er ook daadwerkelijk een ander reactiemechanisme moet plaatsvinden, omdat er een andere overgangstoestand moet zijn, met een lager energieniveau. In de praktijk neemt een katalysator dan ook altijd op de een of andere manier deel aan de reactie, maar wordt hij aan het eind van de reactie steeds weer terug gevormd.

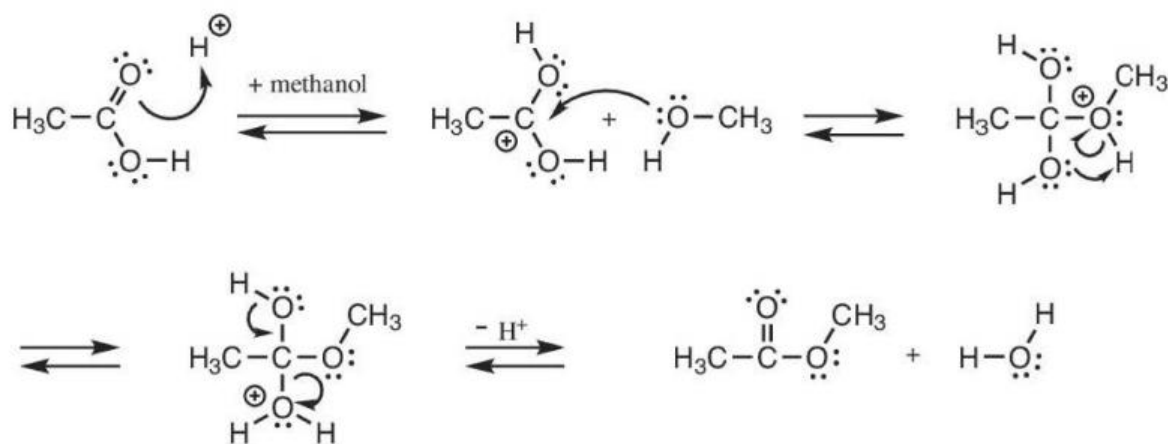
Homogene katalyse

Wanneer de katalysator zich in dezelfde fase bevindt als de reagerende stoffen is er sprake van homogene katalyse. Eén van de manieren waarop een homogene katalysator de snelheid van een reactie kan versnellen, is door de polariteit van atoombindingen in karakteristieke groepen te versterken. Zuren kunnen op deze manier als katalysator functioneren door een H^+ -ion op een deeltje te plaatsen. In Figuur 11 kun je zien hoe dat werkt bij ethanol. Het C-atoom van ethanol, dat aan een O-atoom vastzit, is als gevolg van de polaire atoom binding tussen het C-atoom en het O-atoom, partieel positief geladen, het O-atoom is partieel negatief geladen. Als ethanol in zuur milieu wordt gebracht, kan een H^+ -ion (proton) aan het partieel negatief geladen O-atoom worden gebonden. Daardoor ontstaat er een positieve lading op het O-atoom, waardoor de elektronen in de C-O-atoombinding nog meer van het C-atoom worden losgetrokken en de partiële positieve lading van het C-atoom sterker wordt. De partiële negatieve lading op het zuurstofatoom is nu een positieve lading geworden, omdat er een H^+ -ion aan dit zuurstofatoom is toegevoegd. De nucleofiele eigenschappen van het ontstane deeltje zijn versterkt.



Figuur 11: Het geprotoneerde ethanol is een sterker nucleofiel.

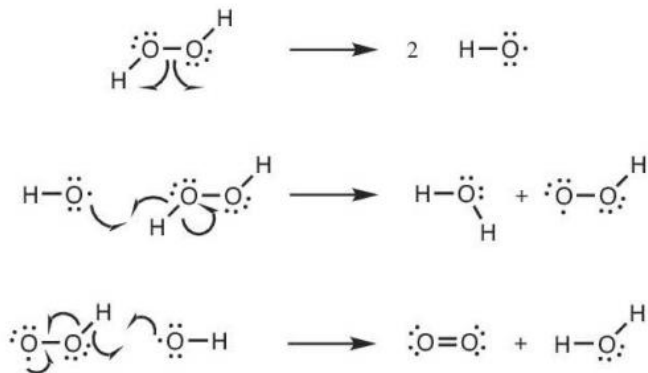
Een reactie die veel sneller in zuur milieu verloopt dan in neutraal milieu is de synthese van een ester. Opname van een H^+ -ion door het alkaanzuur leidt hier tot de vorming van een carbokation. De nucleofiele aanval van het alkanol op het alkaanzuur verloopt hierdoor veel gemakkelijker. Aan het eind van de reactie wordt het H^+ -ion weer terug gevormd (Figuur 12).



Figuur 12: De zuur-gekatalyseerde verestering van ethaanzuur en methanol.

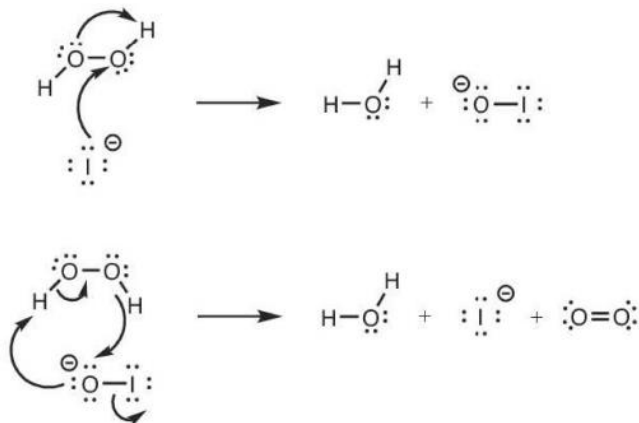
I als homogene katalysator voor de ontleding van waterstofperoxide

De spontane ontleding van waterstofperoxide (Figuur 13) vindt erg langzaam plaats, omdat er een hoge activeringsenergie voor nodig is.



Figuur 13: Spontane ontleding van waterstofperoxide.

In aanwezigheid van jodide-ionen ontleedt waterstofperoxide volgens een geheel ander mechanisme (Figuur 14). Doordat deze reactie een lagere activeringsenergie heeft, verloopt de reactie veel sneller. Toevoeging van wat zeepsop aan het reactiemengsel zorgt voor een spectaculair effect (Figuur 15).



Figuur 14: De door jodide-ionen gekatalyseerde ontleding van waterstofperoxide.



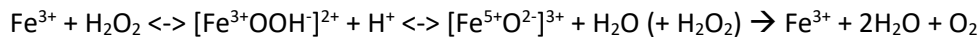
Figuur 15: De gekatalyseerde ontleding van waterstofperoxide levert in combinatie met wat zeepsop een bijzonder spektakel op.

Fe³⁺ als homogene katalysator voor de ontleding van waterstofperoxide

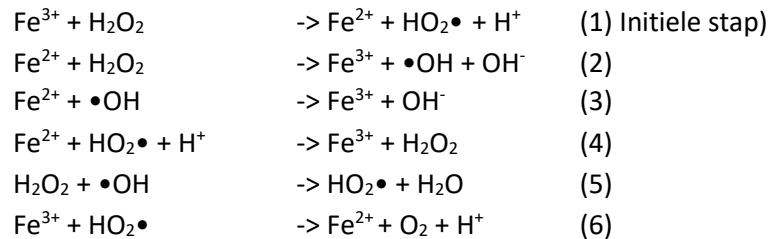
Er zijn vele wetenschappelijke studies uitgevoerd naar de werking van de katalysator Fe(NO₃)₃. Dit blijkt behoorlijk complex te zijn. Er zijn twee mechanismen voorgesteld, namelijk 1) een redox gedreven katalyse en 2) een radicaal gedreven katalyse. Beide mechanismen worden hieronder kort toegelicht.

1. Redox gedreven katalyse. Een van de voorgestelde mechanismen gaat uit van het koppel Fe³⁺/Fe²⁺. Fe³⁺ wordt gereduceerd tot Fe²⁺ door H₂O₂, waarbij zuurstof en protonen ontstaan. In een tweede stap wordt Fe²⁺ geoxideerd waarbij wederom Fe³⁺ wordt gevormd en water. Dit mechanisme is afgebeeld in Figuur 16.

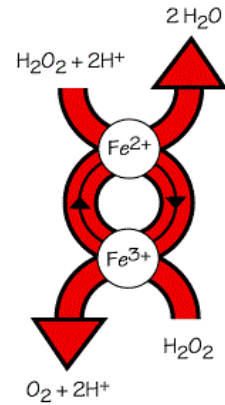
Het Kremer-Stein mechanisme, een ander voorgesteld mechanisme, gaat uit van een Fe³⁺/Fe⁵⁺ koppel. Allereerst wordt een overgangscaplex tussen Fe⁵⁺ en O²⁻ gevormd. Dit complex reageert vervolgens met een ander molecuul H₂O₂ waarbij H₂O, O₂ en (weer) Fe³⁺ ontstaat. In schema:



2. Radicaal gedreven katalyse. Het mechanisme voorgesteld door Haber en Weiss stelt dat de Fe³⁺ ionen een radicaal reactie initiëren. De kettingreactie 'consumeert' vervolgens de waterstofperoxide. In schema:



De tweede stap, waarin het tweewaardige ijzer door waterstofperoxide wordt geoxideerd, staat bekend als een Fenton reactie.



Figuur 16:
Schematische weergave van een redox gedreven katalyse.

Afleiding van:

$$\ln k' = \ln cA' - E_a/RT$$

$$\text{Uit: } s = k(T)[\text{H}_2\text{O}_2][\text{Fe}^{3+}], Q = Cm\Delta T \text{ en } k = Ae^{-E_a/RT}$$

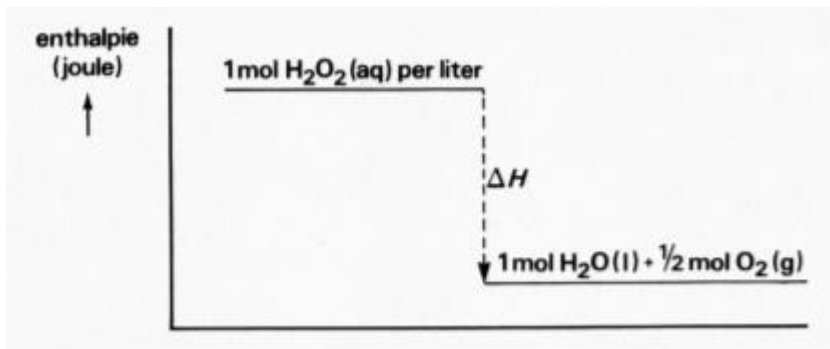
Aan onderstaande afleiding liggen de volgende aannames ten grondslag:

1. Het verlies van massa tijdens de reactie is verwaarloosbaar (De massa zuurstof die ontsnapt is verwaarloosbaar);
2. Geen temperatuur stijging door het roeren van het reactiemengsel;
3. De reactie is adiabatisch.

Als alle vrijgekomen reactiewarmte wordt vastgehouden in de calorimeter, dan geldt:

$$\Delta H^0 \frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} V dt = Cm dT, \quad (\text{formule 1})$$

waarbij ΔH^0 de vormingsenthalpie (J/mol) is en V het volume van het reactiemengsel.



Formule 1 kan worden omgewerkt tot:

$$\frac{dT}{dt} = \left(\frac{\Delta H^0 V}{Cm} \right) \frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} = C' \frac{d[\text{H}_2\text{O}_2]}{dt} \quad (\text{formule 2})$$

Voor een ijzer gekatalyseerde ontleding van waterstofperoxide is de reactievergelijking voor de snelheid beperkende stap gegeven door:

$$s = k(T)[\text{H}_2\text{O}_2][\text{Fe}^{3+}] \quad (\text{formule 3})$$

De snelheid van de ontleding is gelijk een $-d[\text{H}_2\text{O}_2]/dt$. Formule 3 en kan worden beschreven als functie van de snelheid van temperatuurverandering:

$$\frac{dT}{dt} = -C'k(T)[\text{H}_2\text{O}_2][\text{Fe}^{3+}] \quad (\text{formule 4})$$

De concentratie van de katalysator Fe^{3+} blijft uiteraard constant (geen reactant) en kunnen we samennemen met $-C'k(T)$. Het verloop van de reactie, d.w.z. de hoeveelheid resterende waterstofperoxide op een gegeven tijdstip, kan dan worden uitgedrukt als de verandering in temperatuur op dat gegeven tijdstip relatief t.o.v. de begin- en eindtemperatuur van het reactiemengsel. De hoeveelheid resterende waterstofperoxide op een zekere temperatuur T is gelijk aan:

$$[\text{H}_2\text{O}_2]_T = [\text{H}_2\text{O}_2]_0 \frac{T_{\text{final}} - T}{T_{\text{final}} - T_{\text{initial}}} \quad (\text{formule 5})$$

De snelheid op een zeker tijdstip tijdens de reactie is gelijk aan de helling van de grafiek van de temperatuur T tegen de tijd t .

$$\text{Rate}(T) = (\text{slope})_T \text{ en } \text{Rate}(T) = \frac{dT}{dt} \quad (\text{formule 6})$$

Combinatie van formules 4 en 6 resulteert in:

$$\text{Rate}(T) = -C'k(T)[H_2O_2][Fe^{3+}] \quad (\text{formule 7}).$$

De concentratie van H_2O_2 op een zekere temperatuur T is gegeven door formule 5. Combinatie en herschrijven levert:

$$\text{Rate}(T) = -C'k(T)[H_2O_2]_0 \frac{T_{\text{final}} - T}{T_{\text{final}} - T_{\text{initial}}} [Fe^{3+}] \quad (\text{formule 8})$$

$$(\text{slope})_T = \{-C'k(T)[H_2O_2]_0 [Fe^{3+}]\} \frac{T_{\text{final}} - T}{T_{\text{final}} - T_{\text{initial}}} \quad (\text{formule 9})$$

$$(\text{slope})_T = k'(T) \frac{T_{\text{final}} - T}{T_{\text{final}} - T_{\text{initial}}} \quad (\text{formule 10})$$

$$k'(T) = (\text{slope})_T \frac{T_{\text{final}} - T_{\text{initial}}}{T_{\text{final}} - T} \quad (\text{formule 11})$$

Tegelijkertijd geldt voor reacties dat de afhankelijkheid van de reactie voor de temperatuur wordt gegeven in de Arrhenius vergelijking:

$k = Ae^{-E_a/RT}$, waarbij A een constante is, E_a is de activeringsenergie, R de algemene gasconstante en T de temperatuur in kelvin.

Aangezien k' gelijk is aan k met een extra constante (de concentraties voor H_2O_2 en Fe^{3+} zijn erin verwerkt), mag je deze waardes ook verwerken in A , waardoor je krijgt:

$$k' = A'e^{-E_a/RT}$$

Wanneer je de (natuurlijke) logaritme neemt om de e -macht kwijt te raken dan krijg je:

$$\ln k' = \ln cA' - E_a/RT$$

In cA' kennen we niet, maar door $\ln k'$ en $1/T$ grafisch weer te geven kunnen we wel de waarde van E_a/R bepalen.