

## الفصل الأول

---

### مفاهيم أساسية

---

ويتضمن هذا الفصل:

- 1.1 التركيب الالكتروني لذرة الكربون.
- 2.1 القطبية في الجزيئات العضوية.
- 3.1 المتطلبات الثيرموديناميكية والحركية للتفاعل.

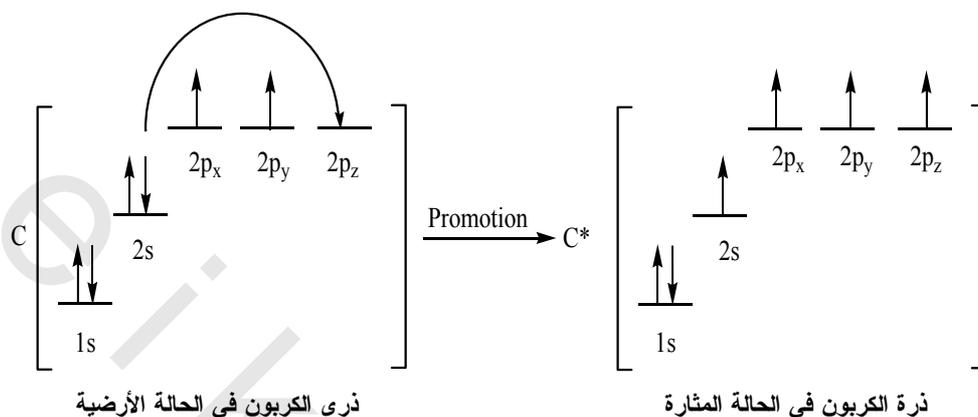
## 1-1 التركيب الإلكتروني لذرة الكربون

### Electron Configuration of Carbon atom

من المعروف أن الخواص الكيميائية للعنصر تعتمد على التركيب الإلكتروني للمدار الأخير للعنصر، وبالنظر إلى الكربون نجد أنه يحتوي على أربعة إلكترونات في مداره الأخير اثنان منها في المدار  $2S$  ، واثنان موجود كل منهما بشكل منفرد في المدار  $2P$  ، وعليه يمكن كتابة التوزيع الإلكتروني لذرة الكربون كالآتي  $1S^2 2S^2 2P^2$ .

ومن هنا يمكن توقع أن يكون الكربون عنصراً ثنائي التكافؤ ( Divalent element) وذلك لوجود إلكترونين فقط بشكل منفرد (Unpaired electrons) متواجدة في المدار  $2P_x$  و  $2P_y$  .

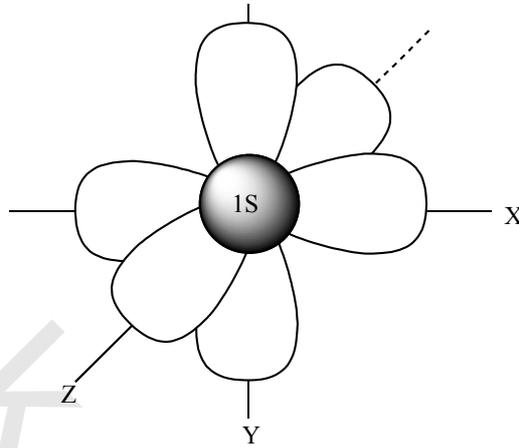
وقد أمكن تفسير التكافؤ الرباعي لذرة الكربون والذي تتواجد به في كل المركبات العضوية تقريباً اعتماداً على عملية انتقال أو ترقية إلكترون (Promotion of electron) من المدار  $2S$  إلى المدار  $2P$  الخالي من الإلكترونات وبالتالي يتوافر عدد أربع إلكترونات مفردة قابلة لتكوين روابط، وللعلم فإن الطاقة اللازمة لعملية الترقية هذه تستمد من الاستقرار الزائد للمادة، أو الجزيئة الجديدة المتكونة، وتعرف هذه الطاقة بطاقة التهيج (Excitation energy) وهي تساوي 96 كيلوسعر/مول بالنسبة لذرة الكربون، وبالتالي ومما سبق يتضح أن لذرة الكربون في الحالة المثارة (Excited state) أربع إلكترونات مفردة متواجدة في ثلاث مدارات  $2P$  ومدار  $2S$ ، هذه الإلكترونات الأربعة قابلة للارتباط بأربع ذرات أخرى سواء كانت كربون أو غيرها، ويمكن توضيح ذلك كما بالشكل (1-1):



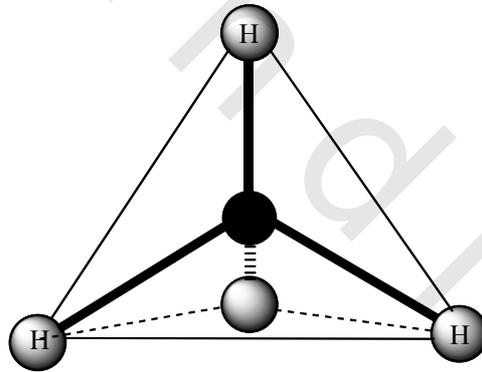
الشكل (1-1) يوضح عملية الإثارة لذرة الكربون (انتقال إلكترون من مدار 2S إلى 2P)

والى هذا الحد يفسر الشرح السابق أن ذرة الكربون في الحالة المثارة يمكنها أن تكون أربع روابط مع أربع ذرات أخرى، إلا أن هذا التفسير يبين أن هذه الروابط الأربعة يجب أن تكون غير متساوية في الطاقة، وذلك لأن المدارات التي تتواجد بها الإلكترونات تختلف عن بعضها، فبعض الإلكترونات متواجدة في المدار S والأخرى متواجدة في المدار P عالي الطاقة، وهذا مخالف للحقائق العملية التي تؤكد أن الروابط الأربعة حول ذرة الكربون في الميثان مثلاً متساوية في الطول ( $1.09 \text{ \AA}$ ) ولها نفس الطاقة، كذلك فإن ارتباط ذرة الكربون المثارة مع أربع ذرات هيدروجين يؤدي إلى أن تكون زوايا الروابط مختلفة، فالزاوية بين مدارات  $P_x$ ،  $P_y$ ،  $P_z$  هي  $90^\circ$ . (أنظر الشكل 1-2 ، 1-3) في حين وجد أن الزاوية بين أي رابطتين في جزيئة الميثان تساوي  $109.5^\circ$ .

■ ■ الفصل الأول ■ ■



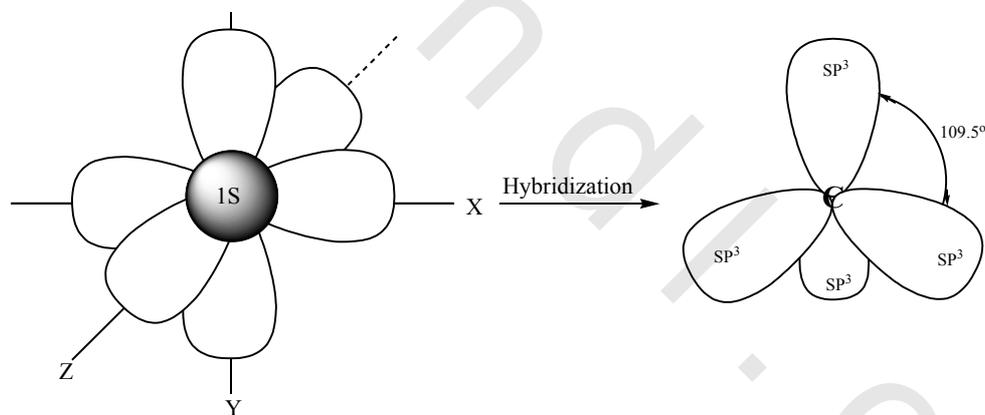
الشكل (1-2) يوضح المدارات الذرية لذرة الكربون  
لاحظ أنّ الزاوية بين المدارات P تساوى  $90^\circ$



الشكل (1-3) يوضح الشكل الفراغي لجزيئة الميثان  
لاحظ الزاوية بين أي رابطتين تساوى  $109.5^\circ$

إنّ الشكل الذي تتواجد عليه هذه الجزيئة هو الهرم رباعي السطوح (Tetrahedral) وإنّ تواجد الجزيئة على هذه الشكل يؤدي إلى أفضل توزيع لذرات الهيدروجين حول ذرة الكربون في الميثان، مما يؤدي إلى أفضل تداخل بين مدارات ذرات الهيدروجين ومدارات ذرة الكربون، ولكن هذا الوضع لا يمكن الوصول إليه إذا

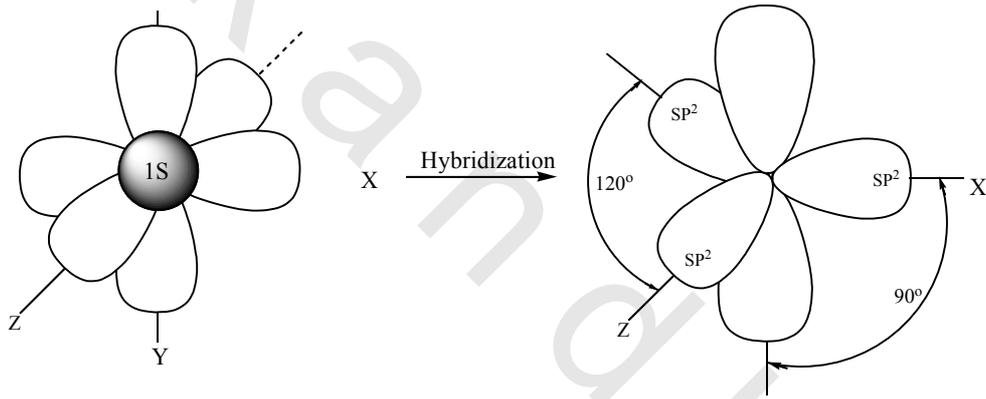
بقيت مدارات ذرة الكربون المثارة في حالتها الذرية، ومن هنا أُفترضت عملية تهجين المدارات الذرية (أي خلطها) (Hybridization) للحصول على مدارات مهجنة حسب عدد الروابط في الجزيئة، ففي حالة ذرة الكربون في الميثان (وينطبق ذلك على أي ذرة كربون مشبعة في أي جزيئة أخرى) يتم خلط أو تهجين ثلاث مدارات P مع مدار S للحصول على أربع مدارات من نوع  $SP^3$ ، وتكون هذه المدارات المهجنة متساوية في الطاقة ومتماثلة في الشكل، ويحتوي كل مدار مهجن  $SP^3$  على إلكترون مفرد، وتتوزع الأربع مدارات المهجنة هذه حول ذرة الكربون بشكل متماثل، وتكون الزاوية بين أي منها تساوي  $109.5^\circ$ ، وفيما يلي شكل تخطيطي يوضح عملية التهجين (شكل 4-1).



الشكل (4-1) يوضح التهجين والترابط في جزيئة الميثان

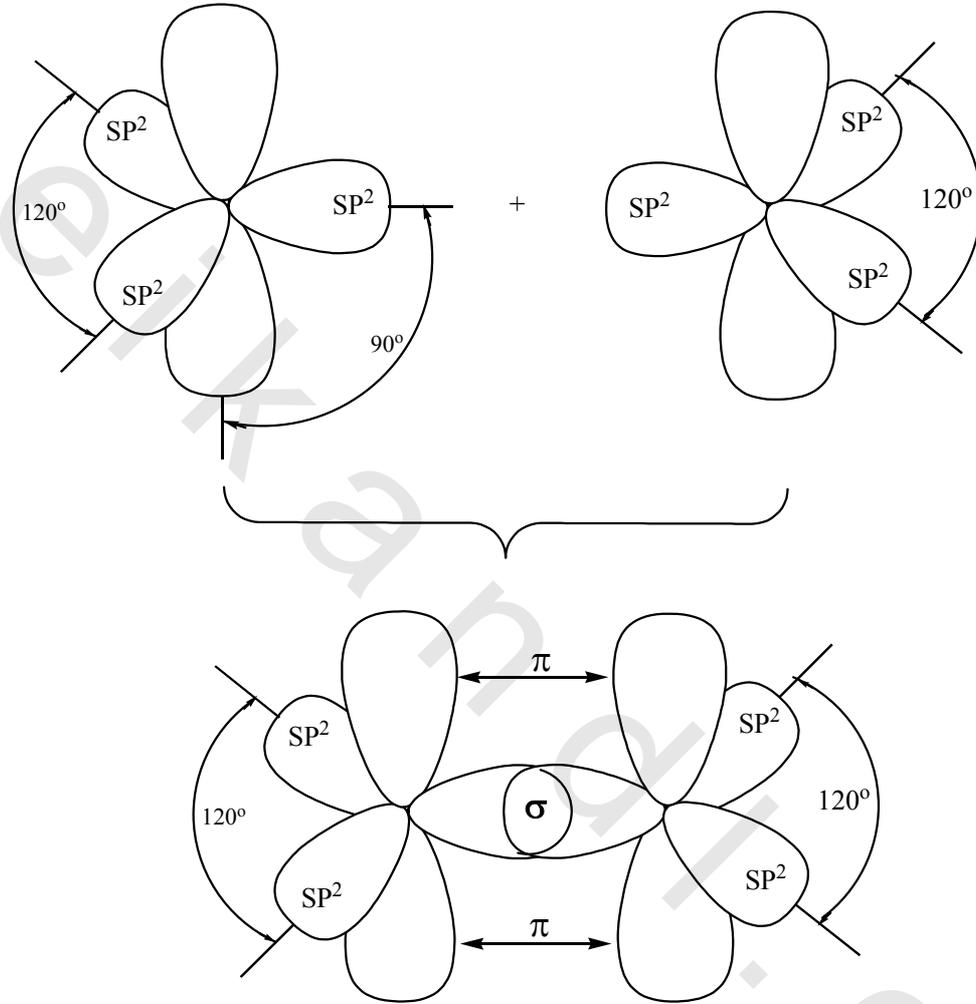
أما عملية التهجين التي تحدث في حالة ذرة الكربون المرتبطة برابطة مزدوجة كما في الألكينات (Alkenes) ( $C = C$ )، وذرة الكربون في مجموعة الكربونيل ( $C=O$ ) وغيرها، والتي تمتلك ذرة الكربون فيها ثلاث روابط فردية من نوع  $\sigma$ ، فإنها تتضمن خلط أو تهجين ثلاث مدارات ذرية لتتكون ثلاث مدارات مهجنة من

نوع  $SP^2$  ، لأن المدارات التي تم خلطها هي مدار من نوع S ومداران من نوع P إذاً الناتج هو  $SP^2$  والعدد هو 3 ، وهنا تتوزع هذه المدارات المهجنة  $SP^2$  حول ذرة الكربون بشكل مثلث مستوي في الفراغ (Planer triangular)، وتكون الزاوية بين كل منها  $120^\circ$  ، في حين يبقى مدار واحد من نوع P غير داخل في التهجين، وهذا المدار يكون بشكل عمودي على مستوى المدارات المهجنة الثلاثة كما هو موضح في الشكل (1-5).



الشكل (1-5) يوضح عملية تحول المدارات الذرية إلى مدارات مهجنة من نوع  $SP^2$

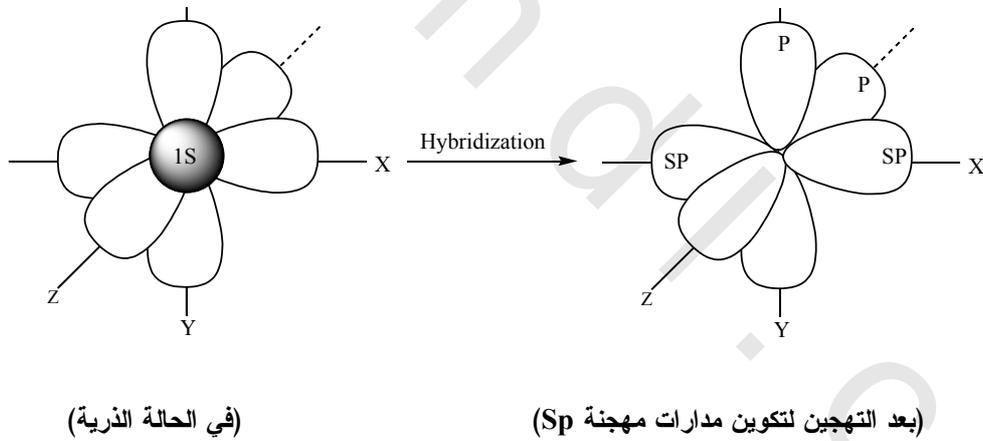
وبأخذ الإيثيلين كمثال، فإن تداخل أحد مدارات  $SP^2$  المهجنة لذرة الكربون الأولى مع مدار مهجن  $SP^2$  لذرة الكربون الثانية، يؤدي إلى تكون رابطة من نوع  $\sigma$  في حين أن المدارين الباقين لكل ذرة كربون يكونان روابط مع ذرات الهيدروجين، أما المدارين P لذرتي الكربون فيتداخلان بشكل متوازي (Parallel) ويكون هنا التداخل أقل من تداخل مدارات  $SP^2$  ليكونا الرابطة  $\pi$  كما هو موضح في الشكل (1-6).



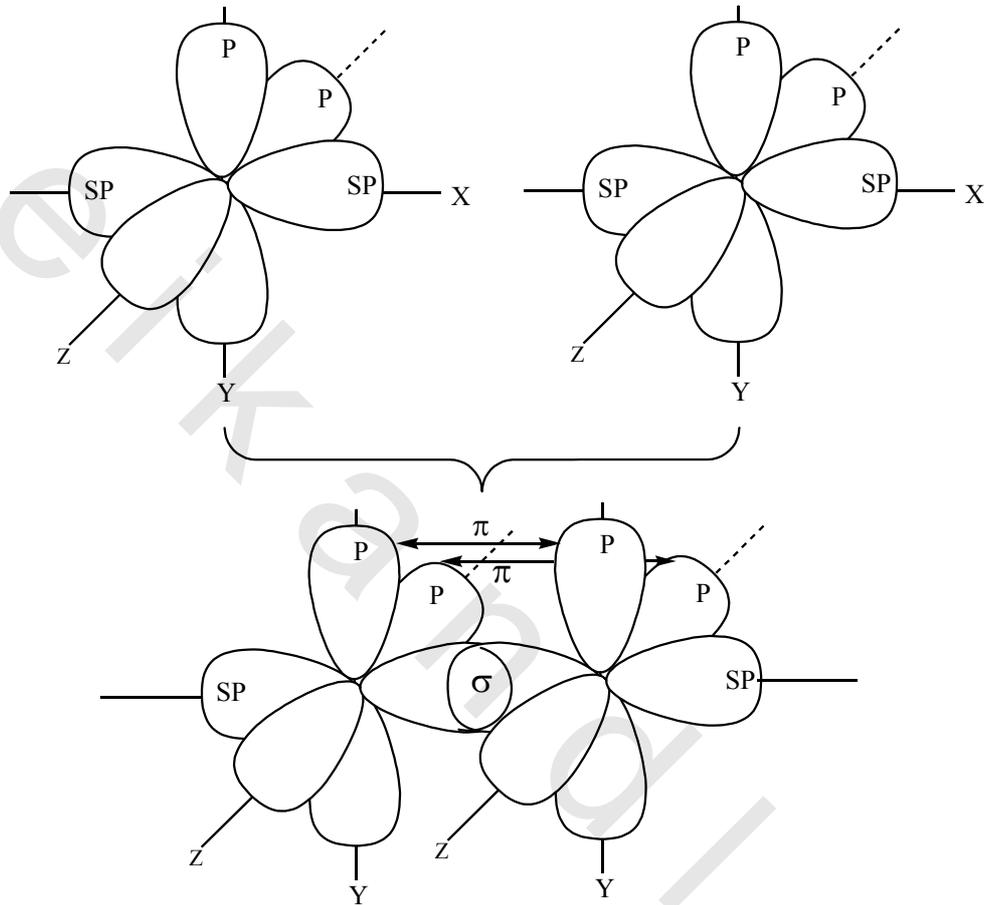
الشكل (1-6)

أما في حالة ذرة الكربون ذات الرابطة الثلاثية (Triple Bond) مثلما في الألكاينات (Alkynes)، أو كما في حالة النيتريلات (Nitriles) فتكون ذرة الكربون هنا ذات رابطتين من نوع  $\sigma$  والرابطتين الأخريتين من نوع  $\pi$ ، ولو تفحصنا

جزيئة الأستلين كمثال، لوجدنا أنّ ذرة الكربون في هذه الجزيئة تحتاج إلى مدارين ذريين (غير مهجنين) لتكوين رابطتين  $\pi$  ، كما أنها تحتاج إلى مدارين مهجنين لتكوين الرابطتين  $\sigma$  ، ويتأتى ذلك عن طريق خلط مدار واحد من نوع S مع مدار واحد من نوع P فنحصل على مدارين مهجنين من نوع SP والزاوية بينهما  $180^\circ$ .  
 إن تداخل المدار SP لذرة الكربون الأولى مع المدار SP لذرة الكربون الثانية يؤدي إلى تكون الرابطة  $\sigma$  في حين أن تداخل مدارات P لذرتي الكربون يؤدي إلى تكون رابطتين من نوع  $\pi$  ، إذاً الرابطة بين ذرتي الكربون هي رابطة ثلاثية، أما مداري SP الباقين لذرتي الكربون فيتداخلان مع مدارات S لذرتي الهيدروجين (أو ذرات أخرى مثل الكربون)، ويمكن توضيح ذلك كما في الشكل (7-1).

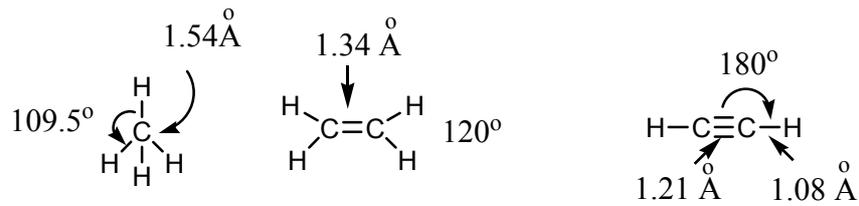


■ ■ مفاهيم أساسية ■ ■

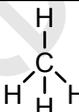


الشكل (1-7)

وإليك مقارنة بسيطة بين أطوال وزوايا الروابط في كلاً من الميثان والإيثيلين والأسيتلين.



جدول (1): الترابط وتهجين ذرة الكربون في الجزيئات العضوية

مثال	موقع الامتصاص في طيف الأشعة تحت الحمراء	أطوال الروابط C-C	أنواع الروابط حول الذرات المركزية	زوايا الروابط	الشكل الهندسي	التهجين	عدد الذرات المرتبطة بالذرة المركزية
	2800-3000 $\text{Cm}^{-1}$ امتطاط (Stretching)	O 1.54° A	4 روابط فردية	109.5°	رباعي السطوح Tetrahedral	SP <sup>3</sup>	4
	3000-3100 $\text{Cm}^{-1}$ امتطاط (Stretching)	O 1.34° A	2 روابط فردية 1 رابطة مزدوجة	120°	مثنى السطوح Triangular	SP <sup>2</sup>	3
$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	3300 $\text{Cm}^{-1}$ امتطاط (Stretching)	O 1.20° A	1 رابطة ثلاثية 1 رابطة فردية	180°	خطي Linear	SP	2

2-1 القطبية في الجزيئات العضوية Polarity in organic molecules

تعتبر معرفة قطبية الروابط والجزيئات ( Polarity of bonds and molecules ) من أهم الأسس التي تُبنى عليها ميكانيكيات التفاعلات، وتؤدي معرفة قطبية الروابط في جزيئة ما إلى معرفة قطبية هذه الجزيئة بشكل عام، ويمكن وصف الجزيئة بأنها جزيئة قطبية إذا كانت محصلة العزم القطبي فيها لا تساوي صفر، ويمكن القول هنا أنها جزيئة ثنائية القطب (Dipole)، ويُعبر عن العزم ثنائي القطب (Dipole Moment) بوحدته تسمى الديباي (Debye) ويرمز لها بالرمز  $D$  ، ويمكن حساب العزم القطبي  $\mu$  عن طريق ضرب قيمة الشحنة في المسافة  $d$  الفاصلة بين الشحنتين ( $\mu = e.d$ ).

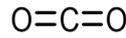
تنشأ القطبية في أي جزيئة نتيجة احتوائها على ذرات مختلفة في الكهروسالبية

(Electronegativity)، مما يؤدي إلى إنزياح الكثافات الإلكترونية المكونة للروابط إلى إحدى الذرات أكثر من الذرات الأخرى، وهذا بدوره يؤدي إلى تكون أقطاب في الجزيئة (قطب موجب ويتمثل في الذرة التي قلت حولها الكثافة الإلكترونية، وقطب سالب، ويتمثل في الذرة التي زادت عندها الكثافة الإلكترونية وهي عادةً الذرة ذات السالبية الكهربية الأعلى)، ومن هنا وبمعرفة الذرات المكونة للرابطة يمكن تحديد ما إذا كانت هذه الرابطة قطبية أم لا، فمثلاً نجد أن جزيئات مثل  $N_2$  ،  $O_2$  ،  $Cl_2$  ،  $H_2$  هي جزيئات غير قطبية، وذلك لتمثل سالبية الذرات المكون لها، وبالتالي فإن هذه الجزيئات ليس لها عزم قطبي، أي أنها جزيئات غير قطبية.

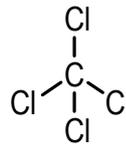
وفي حقيقة الأمر لا تعتمد قطبية الجزيئات على قطبية الروابط فقط، وإنما يلعب الشكل الهندسي، وتوزيع الذرات والمجموعات المكونة للجزيئة في الفراغ دوراً مهماً في القطبية، فمثلاً: لو أخذنا كمثال جزيئة الماء، والمعروفة بأنها جزيئة قطبية، وذلك ليس فقط لاحتوائها على ذرات ذات سالبية مختلفة، وإنما أيضاً لأن لها شكلاً هندسياً يسمح بأن تكون هناك محصلة للعزم القطبي، في المقابل تعتبر جزيئة ثاني أكسيد الكربون  $CO_2$  غير قطبية بالرغم من احتوائها على ذرات مختلفة في السالبية، وتُعزى عدم قطبيتها هنا إلى شكلها الهندسي الذي يجعل من محصلة العزم القطبي تساوي الصفر، وعلى نفس النمط نجد أن جزيئة رابع كلوريد الكربون (Carbontetrachloride) هي جزيئة غير قطبية رغم احتوائها على ذرات مختلفة في السالبية.



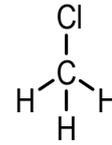
$$\mu = 1.84$$



$$\mu = 0.0$$



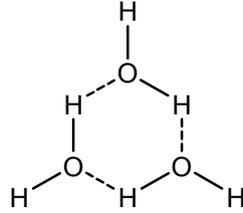
$$\mu = 0.0$$



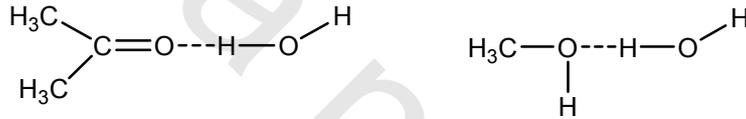
$$\mu = 1.86$$

إن وجود ظاهرة القطبية في جزيئات المادة العضوية يُؤثر بشكل كبير على الخواص الفيزيائية والكيميائية للمادة، فمثلاً من المعروف أن المادة القطبية عادةً ما يكون لها درجات انصهار وغلجان مرتفعة إذا ما قورنت بنظيراتها غير القطبية، كذلك فإن للقطبية دور كبير في الامتزاج والإذابة للمواد، فالمواد القطبية يمكن إذابتها وبسهولة بمذيب قطبي، كذلك المواد غير القطبية تذوب في المذيبات غير القطبية، وهذا متماشياً مع القاعدة العامة المعروفة (الشبيه يذيب الشبيه) ( Like dissolves like). كما تجدر الإشارة في هذا الصدد إلى عامل آخر يؤثر في العديد من الخواص للمواد العضوية وهو ما يعرف بالترابط الهيدروجيني ( Hydrogen Bonding)، حيث يؤثر وجود الترابط الهيدروجيني في المادة على خواصها الكيميائية والفيزيائية، فالمادة التي تسمح جزيئاتها بتكون روابط هيدروجينية عادةً ما يكون لها درجات انصهار وغلجان مرتفعة، مقارنة بنظيراتها التي لا تكون روابط هيدروجينية، كما أن قابلية تكوين الروابط الهيدروجينية في جزيئات المادة تلعب دوراً كبيراً في قابليتها للذوبان في مذيب دون الآخر أيضاً ويؤثر هذا العامل في بعض الحالات على سلوك الجزيئة في التفاعلات من ناحية الميكانيكية وسرعة التفاعل أو التوجيه، كما أن له دوراً كبيراً في التأثير على الحامضية لبعض الجزيئات العضوية (سنتطرق إلى بعض الأمثلة التي توضح ذلك خلال الفصل القادم)، ويُشترط لتكون الرابطة الهيدروجينية بين جزيئتين وجود ذرة هيدروجين مرتبطة بذرة ذات سالبية عالية مثل الكبريت، الأكسجين، النيتروجين وغيرها، كما في حالة مجموعة الهيدروكسيل في الكحولات ومجموعة SH- في الثيولات... إلخ. وسميت هذه الرابطة بالهيدروجينية لأنها لا تتكون إلا من خلال ذرة الهيدروجين كما في حالة الكحولات، الماء، وغيرها من الجزيئات، ومن الملاحظ هنا أن استقطاب الرابطة بين الذرة ذات السالبية العالية وذرة الهيدروجين يلعب دوراً مهماً في تكوين هذا النوع من الترابط.

■ ■ مفاهيم أساسية ■ ■

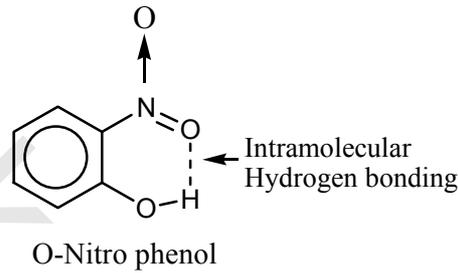


ولا يشترط في الرابطة الهيدروجينية أن تتكون بين الجزيئات من نفس النوع فقط وإنما يمكن أن تتكون بين جزيئات مختلفة مثل جزيئات الماء والكحول أو جزيئات الماء والكيون كما هو موضح فيما يلي:

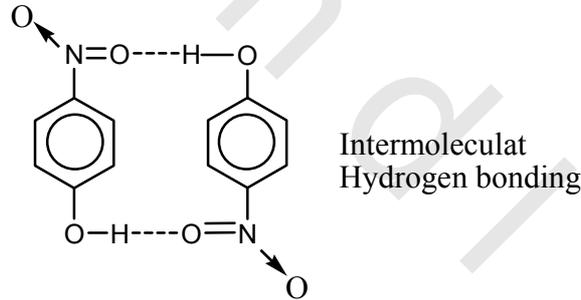


ومما تجدر الإشارة إليه هو إمكانية تكون الروابط الهيدروجينية داخل الجزيئة نفسها، وهنا يعرف هذا النوع من الترابط بالترابط الهيدروجيني الداخلي (Intramolecular Hydrogen bonding)، في حين أن الترابط الهيدروجيني بين الجزيئتين يُعرف بـ (Intermolecular Hydrogen bonding) وكمثال على الحالة الأولى ما يحدث في المركب O - Nitro phenol، حيث تتكون الرابطة الهيدروجينية داخل الجزيئة بين مجموعة النيترو  $\text{NO}_2$  ومجموعة الهيدروكسي - OH عبر ذرة هيدروجين مجموعة الهيدروكسيل، إنَّ هذا النوع من الترابط الهيدروجيني يعمل على خفض درجات الانصهار والغليان للمواد، وذلك لأنه يحل محل الترابط الهيدروجيني بين الجزيئات، فنلاحظ أن درجة انصهار المركب O-Nitro phenol هي  $45^\circ\text{C}$ ، في حين أن درجة انصهار الأيزومر بارا هي  $114^\circ\text{C}$ ، حيث تكون الروابط الهيدروجينية من النوع (Intermolecular) أي أنها روابط

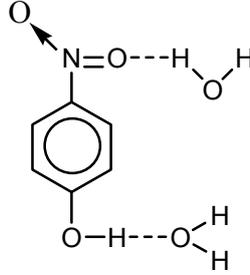
هيدروجينية بين الجزيئات، وليست داخل الجزيئة مما يؤدي إلى ترابط الجزيئات مع بعضها وبالتالي ترتفع درجات الانصهار والغليان.



الترابط الهيدروجيني الداخلي يمنع تكون الترابط الهيدروجيني بين الجزيئات مما يؤدي إلى خفض درجات انصهار وغليان المواد.



ومما تجدر الإشارة إليه هنا، أنّ الترابط الهيدروجيني الداخلي في جزيئة مثل الأورثونيتروفينول يقلل من ذائبيتها في الماء مثلاً، وذلك لأنه يحل محل الترابط الهيدروجيني بين الجزيئة المذابة والمذيب، وهذا ما يفسر أن ذائبية الأيزومر أورثو أقل من ذائبية الأيزومرات بارا وميثا. لاحظ الجدول 2.



الترابط الهيدروجيني بين جزيئات المادة والمذيب

جدول (3) يوضح بعض الثوابت الفيزيائية ذات العلاقة بالترابط الهيدروجيني

Compound	B. P C° at 70 mm Hg	M. P C°	Solub g/100gH <sub>2</sub> O
O-Nitro phenol	100	45	0.2
m-Nitro phenol	194	96	1.35
p-Nitro phenol	dec	114	1.69

### 3-1 المتطلبات الثيرموديناميكية والحركية للتفاعل:

Thermodynamic and Kinetic Requirements for the reaction:

أي تفاعل كيميائي من أي نوع عادةً ما يترافق مع تغييراً فيما يعرف بالإنثالبي (Enthalpy) ( $\Delta H$ ) والانتروبي (Entropy) ( $\Delta S$ ) والطاقة الحرة (Free energy) ( $\Delta G$ )، ويمكن ربط هذه المتغيرات الثلاث بمعادلة واحدة وهي:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

كذلك فإن الطاقة الحرة  $\Delta G$  يمكن ربطها مع ثبات التفاعل الكيميائي بالمعادلة الآتية:

$$\Delta G = -RT \ln K$$

والآن تعتبر قيم  $\Delta G_f^0$  و  $\Delta H_f^0$  من القيم المعروفة والثابتة للعديد من المركبات، حيث يشير حرف f إلى أن هذه القيم لـ  $\Delta G$  و  $\Delta H$  هي قيم التكوين للمركب (Formation of compound) من عناصره، وتشير علامة 0 إلى أن هذه القيم أُخذت عن الحالة القياسية أي عند 25 درجة مئوية وضغط 1 جوي. ومن هذه القيم يمكن حساب  $\Delta G$  و  $\Delta H$  لأي تفاعل إذا ما علمت باقي الثوابت لكل مادة داخلية في التفاعل وكل مادة ناتجة منه.

$$\Delta H^0 = \sum \Delta H_f^0(\text{products}) - \sum \Delta H_f^0(\text{Reactants})$$

$$\Delta G^0 = \sum \Delta G_f^0(\text{products}) - \sum \Delta G_f^0(\text{Reactants})$$

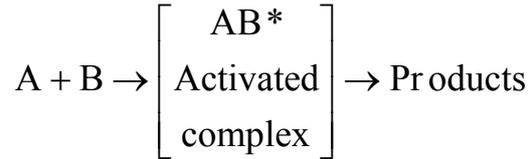
إن معرفة التغير في الطاقة الحرة للتفاعل يسمح بحساب ومعرفة موقع الاتزان (Equilibrium position) والذي منه يمكن الاستدلال على مدى جدوى هذا التفاعل من ناحية إعطاء النواتج.

### طاقة التنشيط الحرة (Free energy of activation):

طبقاً لنظرية الحالة الانتقالية (Transition state theory) فإنه لكي يتم التفاعل الآتي:



يجب أن تتم التصادمات (Collisions) بين جزيئات المواد المتفاعلة بشكل كافي من ناحية الطاقة، ويجب أن تكون بهيئة مناسبة من ناحية التوجيه، وهذا ما يؤهل هذه الجزيئات المتفاعلة لتكوين المعقد المنشط (Activated complex) أو ما يعرف بالحالة الانتقالية (Transition state) والتي وحال تكوينها يمكن أن تعطى المواد الناتجة وفي خطوة سريعة.



إنَّ معدل تفكك الحالة الانتقالية أو المعقد المنشط إلى النواتج يمكن حسابه بالمعادلة الآتية:

$$\text{Rate of decomposition of T.S} = K T / h$$

حيث:

K: ثابت بولتزمان (Boltzmann's constant).

و h: ثابت بلانك (Planck's constant).

و T: درجة الحرارة المطلقة.

$$\therefore \text{Rate of reaction} = K T / h [\text{Activated complex}]$$

وإذا اعتبرنا أنَّ المعقد المنشط يتواجد في حالة اتزان مع الجزيئات المكونة له فإنه يمكن معالجة تفاعل تكون هذا المعقد كما لو كان تفاعل من الدرجة الثانية:



وعليه:

$$K^* = [T.S] / [A][B]$$

$$\therefore [T.S] = K^* [A][B] \quad \dots \quad (1)$$

وهنا فإن موقع الاتزان سيعتمد على الطاقة الحرة اللازمة لتكون الحالة الانتقالية (T,S)، وهنا تشير علامة (\*) إلى أنَّ هذه المعالجة تخص الحالة الانتقالية أو ما أسميناه (المعقد المنشط).

$$\Delta G^* = -RT \ln K^*$$

$$\therefore K^* = e^{-\Delta G^*/RT} \quad \dots \quad (2)$$

وتعرف  $\Delta G^*$  بأنها الطاقة الحرة للتنشيط (Free energy of activation)

$$\text{Rate} = kT/h [T.S] \quad \text{ومن معادلة معدل التفاعل:}$$

وباستخدام المعادلتين (1، 2)

$$\text{Rate} = kT/h e^{-\Delta G^*/RT} [A][B] \quad \dots \quad (3)$$

وبالمقارنة بمعادلة المعدل لأي تفاعل مكون من خطوة واحدة

$$\text{Rate} = k_r [A][B] \quad \dots \quad (3')$$

$$k_r = kT/h e^{-\Delta G^*/RT} \quad \dots \quad (4)$$

وبفصل مكونات الانثروبي ( $\Delta H$ ) والانتالبي ( $\Delta S$ ) باستخدام العلاقة:

$$\Delta G^* = \Delta H^* - T\Delta S^*$$

فان:

$$k_r = kT/h e^{-\Delta H^*/RT} e^{\Delta S^*/R}$$

إنَّ الجزء من المعادلة  $((kT/h)e^{\Delta S^*/R})$  بتغير بشكل طفيف بتغير  $T$

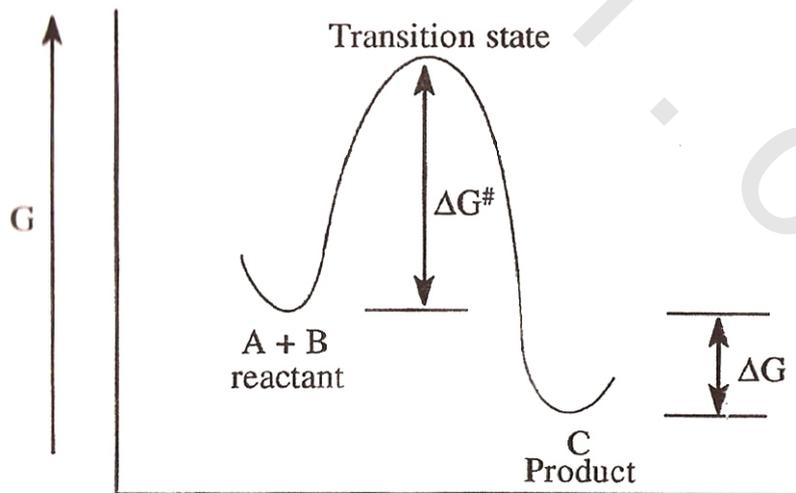
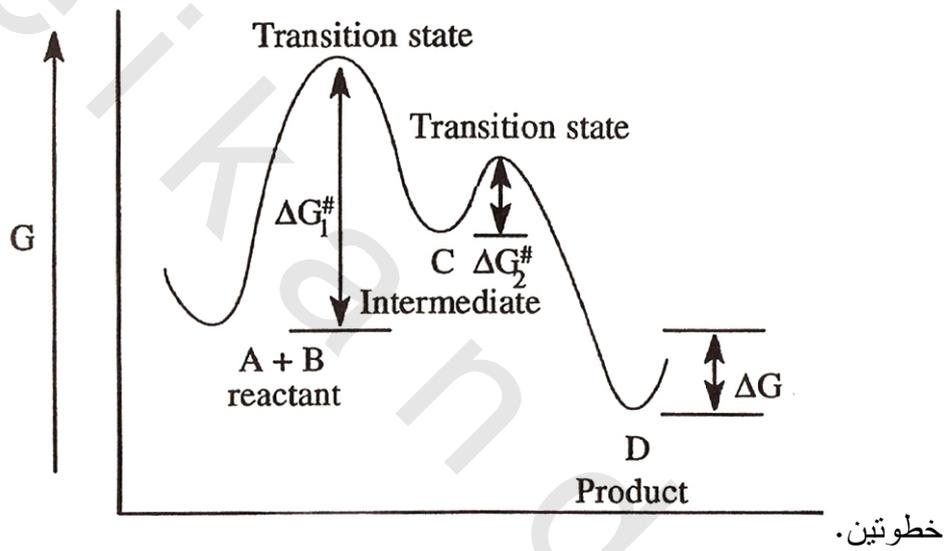
بالمقارنة مع الجزء  $(e^{-\Delta H^*/RT})$  وذلك للطبيعة الأسية Exponential nature للأخير.

حيث تعرف  $\Delta S^*$  بأنثروبي التنشيط.

وفي المعتاد فإن قيم  $\Delta S^*$  و  $\Delta H^*$  تعكس معلومات حول تركيب الحالة

الانتقالية كذلك فان يمكن الحصول على معلومات نوعية حول ميكانيكية التفاعل من

خلال نظرية الحالة الانتقالية والتي يمكن تمثيلها على هيئة منحنى كما هو موضح في الأشكال القادمة والتي تمثل منحنى الطاقة لتفاعلات افتراضية ذات خطوة واحدة.



إنَّ الشكل الأول يوضح منحنى الطاقة لتفاعل بخطوتين والذي يتضح فيه احتواء التفاعل على حالتين انتقاليين، إنَّ طاقة التنشيط الأعلى للحالة الانتقالية الأولى تعني أنَّ الخطوة الأولى هي المفضلة من الناحية الطاقية وبالتالي فهي الخطوة البطيئة والمحددة لسرعة التفاعل.