

Starea de tranziție

Afirmațiile greșite din mai multe manuale de chimie generală referitoare la conceptul de stare de tranziție trebuie clarificate. Termenul de „complex activat” este în mod obișnuit folosit ca sinonim al acestuia, ceea ce este cu siguranță acceptabil pentru un curs de începători. Cu toate acestea, termeni cum ar fi „specii” (substanțe detectabile, precum atomii, moleculele, ionii, radicali liberi, stările excitate), „intermediari” (substanțe detectabile), „specie instabilă cu energie mare” și „pseudomoleculă” nu descriu cum se cuvine starea de tranziție. Deci, ce este o stare de tranziție?

O stare de tranziție nu este o specie sau o reacție intermediară sau o stare pentru că, *prin definiție*, este imposibil să fie izolată sau detectată prin spectroscopie sau prin orice altă metodă. Deci, ce este? Este o aranjare specifică al unui grup stabilit de atomi cu unghi și distanțe de îmbinare care are energia maximă potențială (sau entalpie H sau energie liberă Gibbs G) *pentru fiecare etapă* dintr-un mecanism de reacție. Poate aduce aproape reactanții produșilor, însă nu este nici reactant și nici produs al vreunei etape a mecanismului. Totuși, se presupune că posedă anumite proprietăți ale unei molecule adevărate: masa molară, geometria moleculară, valorile definite ale lui E , H , S , G și V și capacitatea de a se roti sau de a vibra. Distanțele de legare, totuși, sunt întotdeauna mult mai mari decât legările corespunzătoare ale reactanților, produșilor și intermediarilor. Însă, în plus, are proprietăți matematice pe care moleculele nu le posedă. De exemplu, i se atribuie un al patrulea grad de libertate de mișcare de translație. De asemenea, nu are nici un fel de stabilitate. Acest lucru înseamnă că nu există nici un fel de înclinare a curbei de energie potențială la cea mai înaltă stare.

Pe scurt, o stare de tranziție este o structură tranzitorie, rezultatul calculelor matematice bazate pe aplicația inițială a lui Henry Eyring din mecanica statistică sau cuantică asupra vitezei proceselor (1934). Ea separă reactanții și produșii sau reactanții și intermediarii.

Dacă se identifică o stare de tranziție, atunci trebuie să aibă loc o înclinare a curbei, starea de tranziție își pierde statutul și devine un intermediar, iar teoreticienii trebuie să se întoarcă la planșeta de desen și să vină cu două stări de tranziție în locul stării de tranziție propusă inițial. Stările de tranziție sunt în general calculate doar pentru etapa de determinare a vitezi. O paranteză dreaptă și o cruce dublă pot fi folosite pentru a indica că o stare de tranziție nu este clasă sau un produs intermediar al unei reacții. Proprietățile de stare sunt de asemenea indicate cu ajutorul unei cruci duble iar legăturile prin linii întrerupte.

(după Journal of Chemical Education 64, 3, 1987, p. 208)