

Übungen zur Vorlesung Fortgeschrittene Theoretische Chemie A

24. In dieser Aufgabe soll die Reaktionsgeschwindigkeit einer chemischen Reaktion $A \rightarrow B$ mittels der Theorie des Übergangszustandes berechnet werden.

In dem hier verwendeten Modell werden die Reaktionskoordinate und die zu dieser orthogonalen Moden in harmonischer Näherung betrachtet, wobei jeweils verschiedene Frequenzen für die Reaktandengeometrie (ω_i^R) und den Übergangszustand (ω_i^{TS}) verwendet werden (mit $i = 1, \dots, f$).

Berechnen Sie für dieses Modell die Reaktionsgeschwindigkeit im Rahmen der Theorie des Übergangszustandes.