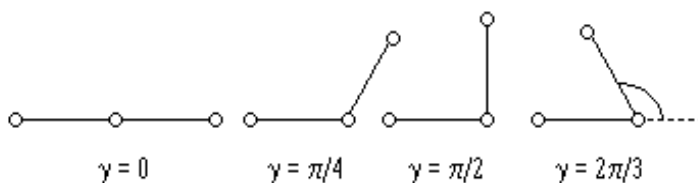
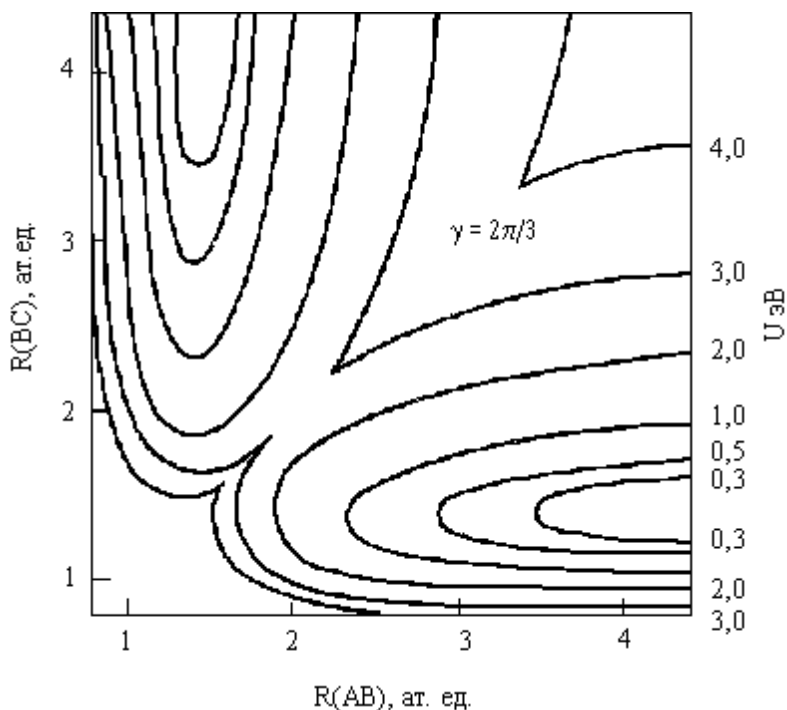


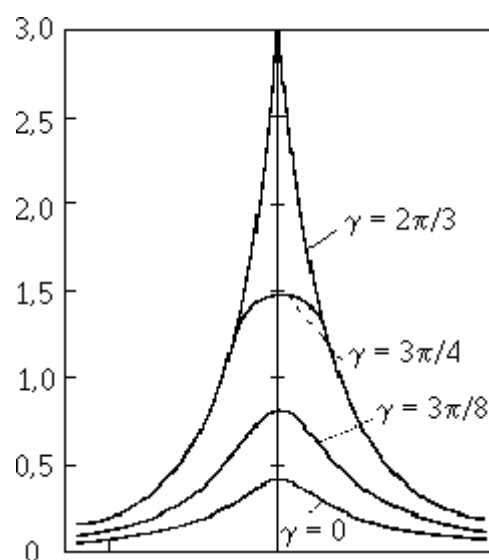
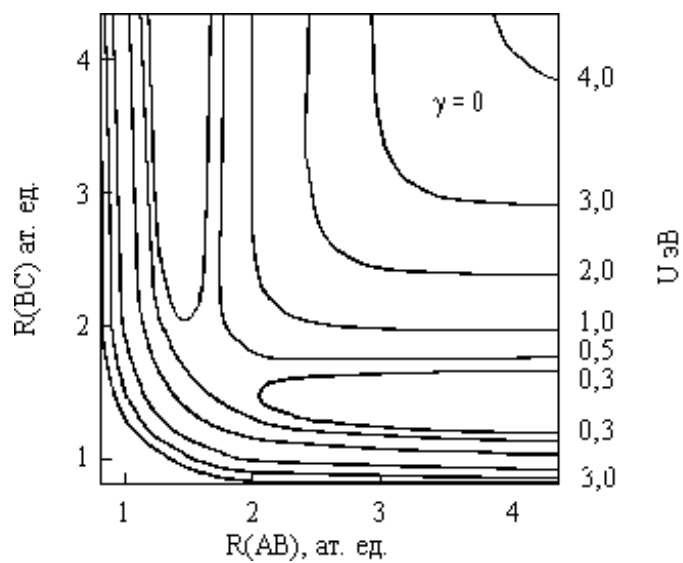
Портер и Карплус провели расчеты ППЭ для взаимодействия $H_2 + H$ для разных конфигураций активированного комплекса:



Принципиально отличалась ППЭ при угле $\gamma = 2\pi/3$. Здесь на линии, отвечающей равенству $R(AB) = R(AC)$ наблюдались изломы (каспы), обусловленные вырождением в системе, имеющей симметрию равностороннего треугольника, и возникновением за счет этого ян-теллеровской неустойчивости.



При других углах встречи атомов общий вид ППЭ принципиально не отличался. Но изменение угла атаки существенно сказывалось на высоте и характере потенциального барьера. При этом при $\gamma = 2\pi/3$ на потенциальной кривой наблюдался излом. Для всех остальных случаев наблюдали плавный переход, но значение энергии потенциального барьера (E) резко отличалась.



Значение угла γ	Энергия, кДж/моль	Отношение экспонент
0	9,186	1
$3\pi/8$	18,713	$6,85 \cdot 10^{-05}$
$3\pi/4$	34,023	$1,39 \cdot 10^{-11}$
$2\pi/3$	69,181	$5,95 \cdot 10^{-27}$

В третьей колонке таблицы приведено соотношение значений $\exp(-E/RT)$, рассчитанных при 500 К и нормированных на значение энергии при угле встреч, равном 0. Очевидно, что все другие конфигурации активированного комплекса, кроме линейного, будут мало вероятны.