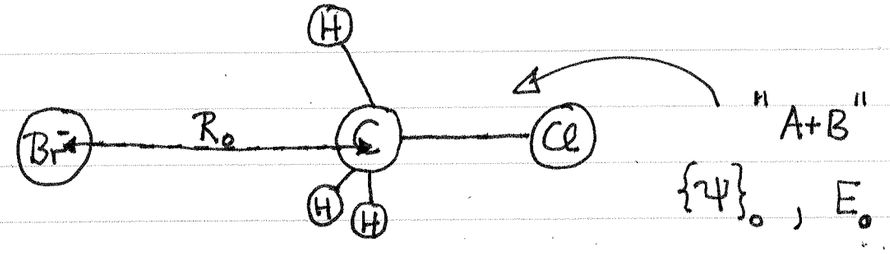
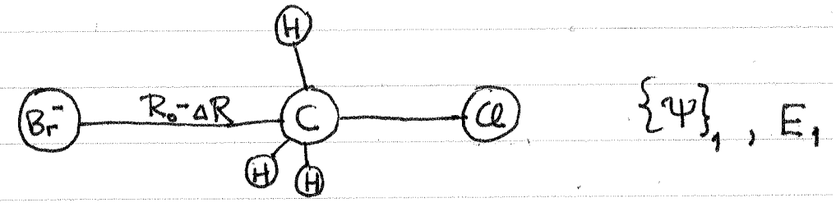
Kan <u>modellere</u> kjemisk reaksjon ved å starte med A+B og endre en "passende valgt" <u>reaksjonskoordinat</u> skrittvis:

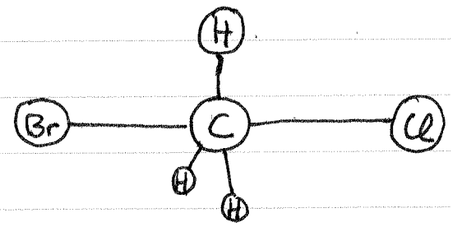
Eksempel: $ClCH_3 + Br^- \longrightarrow BrCH_3 + Cl^-$



$R_1 = R_0 - \Delta R$ holdes <u>fast</u>, resten av geometrien optimeres



$R_n = R_0 - n \cdot \Delta R$



$R_N = R_0 - N \cdot \Delta R$