

1. Calcul de la différence d'énergie entre les OF des deux espèces.

$$\Delta E_1 = \left| \varepsilon_{(H_0)}^{\text{propène}} - \varepsilon_{BV}^{HBr} \right| = \left| -9,98 - 1,20 \right|$$

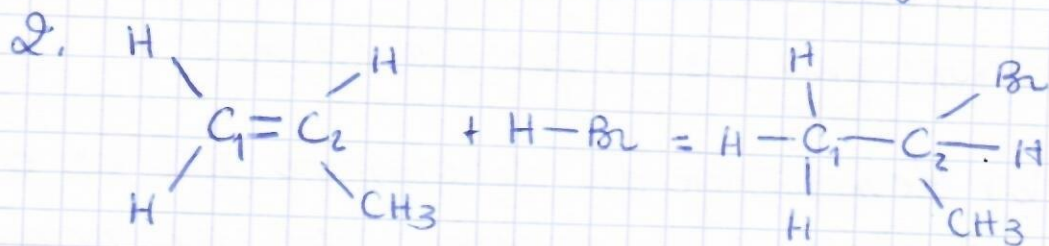
$$\Delta E_1 = 11,18 \text{ eV}$$

$$\Delta E_2 = \left| \varepsilon_{(H_0)}^{HBr} - \varepsilon_{BV}^{\text{propène}} \right| = \left| -11,48 - 1,35 \right|$$

$$\Delta E_2 = 12,83 \text{ eV}$$

$$\Delta E_1 < \Delta E_2$$

Conclusion: nucéophile: propène (réagit avec sa H_0)
électrophile: HBr (réagit avec sa BV)



Dans la H_0 du propène: la densité électronique (le coef) est plus forte sur C_2 que sur C_1 .

Sous contrôle orbitalaire la réaction est plus favorable sur C_2 .