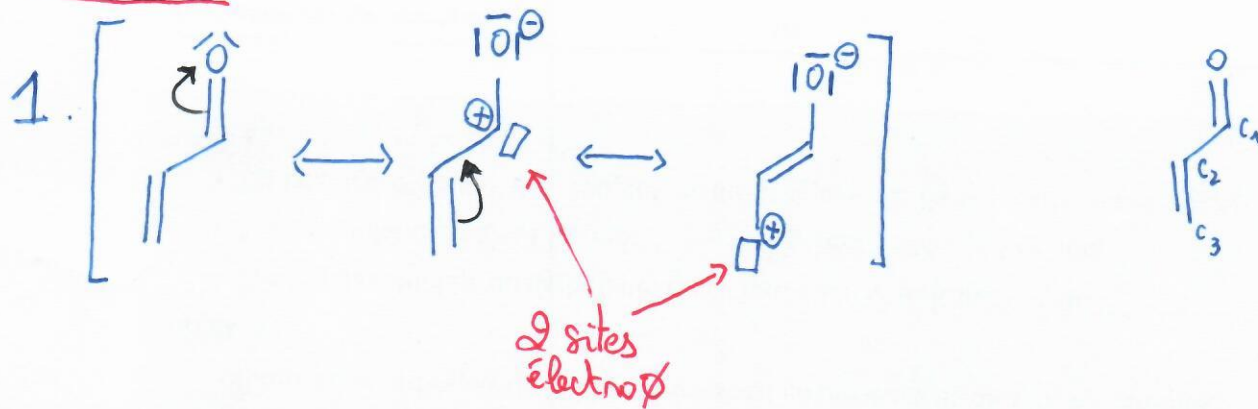
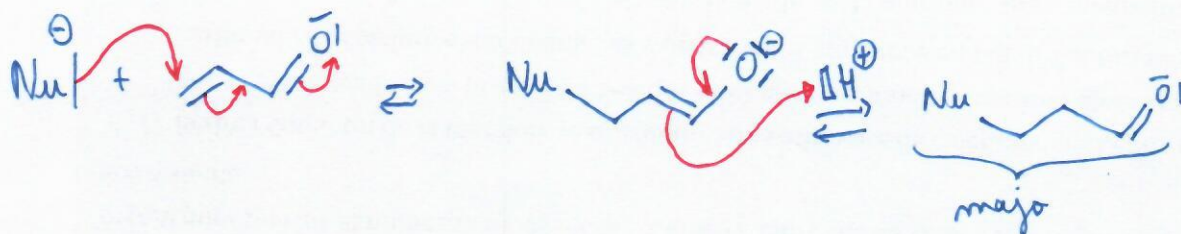


TD Q3.6:



2. Contrôle orbitalaire: \oplus gros coefficient dans la BV donc C_3 .
(électroph)



3. Contrôle de charge: \oplus grosse charge (δ^+) donc C_4

4. Calcul des ΔE_{HO-BV} :

$$\Delta E_1 = |E_{HO}(MeLi) - E_{BV}(\text{acroleïne})| = |-7,76 - (-0,04)| = 7,72 \text{ eV}$$

$$\Delta E_2 = |E_{HO}(Me_2Li) - E_{BV}(\text{acroleïne})| = |-2,42 - (-0,04)| = 2,38 \text{ eV}$$

L'interaction est beaucoup plus forte entre Me_2LiLi et l'acroleïne en termes d'interaction orbitalaire car la HO du nucleophile est plus proche de la BV de l'électrophile que dans le cas de $MeLi$. Ainsi, le contrôle de charge est plus prépondérant pour $MeLi$ que Me_2LiLi .