

### Exercice 3 : Orbitales frontières

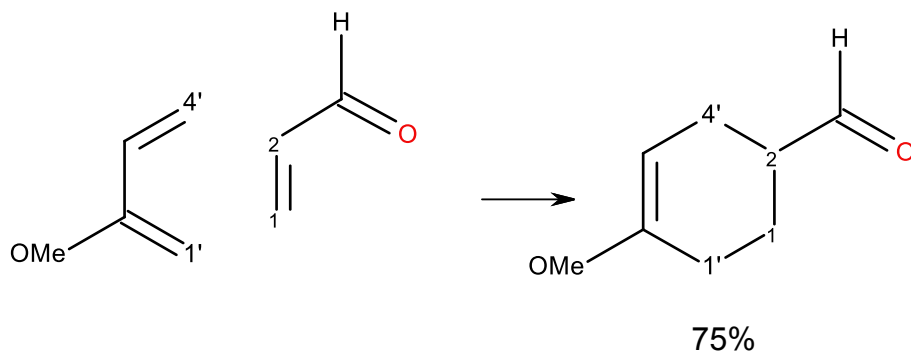
La théorie des Orbitales Frontières dit que les réactions sont modélisables en observant uniquement les orbitales « HOMO » (Highest Occupied Molec. Orbital) et « LUMO » (Lowest Unoccupied Molec. Orb.) des 2 réactifs A et B, nommées HOMO(A), LUMO(A), HOMO(B) et LUMO(B).

On procède de la façon suivante :

On regarde les 2 couples croisés HOMO(A)-LUMO (B) et HOMO(B)-LUMO (A) et on sélectionne celui où l'écart des énergies est le plus faible.

On met en regard les plus gros coefficients des orbitales frontières du couple pour obtenir le produit majoritaire.

1. Vérifiez si cette théorie des orbitales frontières permet d'expliquer le résultat expérimental suivant :



2. Analyser la symétrie des orbitales frontières et vérifiez que le couple d'orbitales frontières a une symétrie compatible.