

**CONCOURS COMMUNS  
POLYTECHNIQUES****ÉPREUVE SPÉCIFIQUE - FILIÈRE TPC**

---

**CHIMIE****Jeudi 3 mai : 14 h - 18 h**

---

*N.B. : le candidat attachera la plus grande importance à la clarté, à la précision et à la concision de la rédaction. Si un candidat est amené à repérer ce qui peut lui sembler être une erreur d'énoncé, il le signalera sur sa copie et devra poursuivre sa composition en expliquant les raisons des initiatives qu'il a été amené à prendre.*

---

|  |
|--|
| <b>Les calculatrices sont autorisées</b> |
|--|

**Le sujet est composé de 4 parties, toutes indépendantes.**

Au sein de chaque partie, les candidats s'efforceront de répondre aux questions dans l'ordre prescrit. Les réponses seront systématiquement justifiées.

Les données utiles et les documents sont regroupés dans le livret : « **Annexe documentaire** ». Il est conseillé d'en prendre connaissance avant de commencer à rédiger.

# ÉTHERS-OXYDES

## Solvants : une nécessité ?

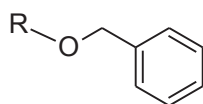
À l'heure où la question des ressources épuisables se pose, la recherche se trouve face à de nouveaux enjeux. De nouvelles façons d'aborder la synthèse organique sont envisagées, où les solvants, supports de nombreuses réactions, tendent à s'effacer, tant pour des raisons environnementales qu'économiques. Néanmoins, les solvants conservent leur intérêt dans de nombreux cas. Ils semblent même indispensables pour certaines applications car ils sont parfois bien plus qu'un simple support. On s'intéresse par la suite à une famille de composés dont l'usage comme solvant (mais pas uniquement) est notoire.

Les éthers-oxydes, famille de composés organiques fondés sur l'enchaînement C–O–C, sont connus *via* un de leur représentant important : l'éthoxyéthane, communément appelé éther, dont plusieurs usages ont été faits depuis sa découverte au XIII<sup>e</sup> siècle (anesthésique, analgésique, solvant, intermédiaires en synthèse organique, etc.).

## Partie I – Éthers-oxydes en synthèse organique

- Q1. Caractériser les propriétés de solvation de l'éthoxyéthane en termes d'interactions et réactions avec les solutés à l'échelle moléculaire. On pourra s'appuyer sur le **document 1**, annexe documentaire, page 2.
- Q2. Proposer une explication au fait que l'éthoxyéthane présente un moment dipolaire non nul.
- Q3. Proposer une explication au fait que le 1,4-dioxane présente un moment dipolaire non nul. On pourra raisonner par analogie avec le cyclohexane.
- Q4. Expliquer le rôle primordial des éthers-oxydes dans la synthèse d'un organomagnésien mixte.
- Q5. Citer une autre réaction où l'utilisation des éthers-oxydes comme solvant est nécessaire pour des raisons proches de celles de la **question Q4**.
- Q6. Pour la synthèse de certains organomagnésiens mixtes, on peut utiliser le tétrahydrofurane (THF). Analyser les avantages et inconvénients de ce dernier par rapport à l'éthoxyéthane.

En dehors de leur usage comme solvant, les éthers-oxydes sont aussi utilisés en synthèse organique, en particulier les éthers benzyliques de formule générale :



- Q7. Proposer une méthode de synthèse d'éther benzylique à partir d'alcool. On précisera les équations des réactions, les conditions expérimentales et les mécanismes réactionnels adaptés à l'exemple choisi.
- Q8. Dans le **document 2**, annexe documentaire, page 3, le groupe protecteur A peut être un éther benzylique. Analyser précisément son rôle dans la synthèse proposée.
- Q9. Proposer une méthode de transformation des éthers benzyliques en alcools en vue de la déprotection de fonction.

## Partie II - Obtention des éthers-oxydes par déshydratation

Les éthers-oxydes peuvent également être obtenus par déshydratation des alcools.

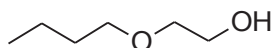
- Q10.** Donner le mécanisme de la déshydratation intramoléculaire proposée dans le **document 3**, annexe documentaire, page 4.
- Q11.** Sachant que les ions  $H^+$  ont un rôle catalytique dans la déshydratation intermoléculaire (**document 3**), proposer un mécanisme pour cette réaction.
- Q12.** Montrer qu'à température et pression imposées, les trois équilibres présentés dans le **document 3** ne peuvent pas coexister. Qu'en est-il en présence d'un gaz inerte ?
- Q13.** Dans le procédé mis en place par H. L. Duhamel du Monceau (**document 3**), la réaction est menée en même temps qu'une distillation. Indiquer un intérêt à procéder ainsi.
- Q14.** Par un raisonnement thermodynamique clairement explicité, indiquer dans quelles conditions de température il vaut mieux se placer pour éviter la formation d'alcènes.
- Q15.** Lors de la formation d'éther, à l'équilibre, l'éthanol restant se répartit dans deux phases : une phase aqueuse (notée *aq*) et une phase organique (notée *org*) (**document 4**, annexe documentaire, page 5). Montrer que pour des concentrations faibles en éthanol restant, le rapport des fractions molaires d'éthanol vérifie :

$$\frac{x_{\text{éthanol}}^{org}}{x_{\text{éthanol}}^{aq}} \approx 1,6 \text{ (à 298 K).}$$

- Q16.** Dans l'hypothèse où les mélanges éthanol-eau et éthanol-éther sont idéaux, en déduire la valeur de la différence des potentiels chimiques standard (en référence au corps pur) de l'éthanol dans les deux phases à 298 K :  $\mu^{\circ}_{\text{éthanol}(aq)} - \mu^{\circ}_{\text{éthanol}(org)}$ .
- Q17.** Commenter l'hypothèse d'idéalité du mélange éthanol-eau.
- Q18.** Lorsque la proportion d'éthanol augmente, une partie de l'eau passe en phase organique et une partie de l'éther passe en phase aqueuse. Pour une fraction en éthanol supérieure à 30 %, les deux phases deviennent complètement miscibles et n'en forment plus qu'une. Proposer une explication à ce phénomène.

## Partie III - L'EGMBE : un solvant pour les peintures

L'éthylène glycol monobutyléther (EGMBE ou 2-butoxyéthanol), dont la formule est donnée à la **figure 1**, est utilisé comme co-solvant dans les peintures, notamment pour ses propriétés amphiphiles. Il présente un phénomène de solubilité inverse avec l'eau (**document 4**) : sa solubilité diminue lorsque la température augmente. Sur une large plage de composition, une phase liquide unique se sépare en deux phases liquides lorsque la température augmente. Cette propriété est parfois mise à profit dans l'élimination de ce composé organique dans des effluents aqueux. Le traitement de ces effluents est requis eu égard à la nocivité de l'EGMBE (**document 5**, annexe documentaire, page 5).



**Figure 1** – Formule topologique de l'EGMBE

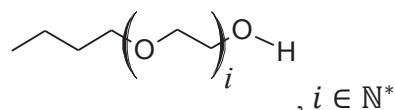
- Q19.** Proposer une méthode expérimentale de séparation d'un mélange EGMBE-eau pour une composition initiale de 40 % en masse d'EGMBE.
- Q20.** Un composé amphiphile est constitué de molécules présentant à la fois des caractères d'hydrophilie et d'hydrophobie. Justifier le caractère amphiphile de l'EGMBE.
- Q21.** Expliquer en quoi le caractère amphiphile peut expliquer la bonne pénétration cutanée de l'EGMBE. On pourra s'appuyer sur le **document 6**, annexe documentaire, pages 6 et 7.
- Q22.** L'EGMBE est métabolisé par l'organisme, *via* le cytochrome P-450, en butanal et éthane-1,2-diol. Proposer une équation de réaction pour cette transformation et préciser le rôle du cytochrome P-450.

L'EGMBE est produit classiquement à partir d'oxyde d'éthylène (ou époxyéthane) et de butan-1-ol comme décrit dans le **document 7**, annexe documentaire, pages 8 et 9. Ces composés étant eux-mêmes issus d'éthène et de propène, produits de la pétrochimie (**document 8**, annexe documentaire, page 10).

- Q23.** Proposer une méthode de synthèse de l'oxyde d'éthylène alternative à celle indiquée dans le **document 8**. Analyser les avantages et inconvénients des deux méthodes.
- Q24.** Donner l'équation de la réaction d'hydroformylation.
- Q25.** Proposer une méthode pour obtenir le butan-1-ol à partir d'un produit d'hydroformylation.
- Q26.** Indiquer la formule du catalyseur dans le cycle d'hydroformylation du **document 8**.
- Q27.** Préciser la nature des étapes n°③ et ⑤ dans le cycle d'hydroformylation du **document 8**.
- Q28.** À l'aide d'un modèle orbitalaire adapté, expliquer en quoi la coordination d'un alcène sur un complexe de métal de transition peut rendre cet alcène électrophile. Justifier ainsi la transformation intervenant dans l'étape n°③ du cycle d'hydroformylation. On pourra s'appuyer sur les données du **document 9**, annexe documentaire, page 11.
- Q29.** Proposer un mécanisme réactionnel de la formation de l'EGMBE selon la réaction indiquée dans le **document 7**. On pourra modéliser le catalyseur basique par B.
- Q30.** Faire l'analyse cinétique du mécanisme précédent moyennant des hypothèses qui seront clairement explicitées de façon à retrouver la forme de la loi de vitesse expérimentale.
- Q31.** Évaluer la vitesse de formation de l'EGMBE (en  $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ ) à l'aide de la loi de vitesse expérimentale et des données du **document 7**, en considérant que les réactifs sont introduits dans le réacteur de telle sorte que leur concentration soit constante.
- Q32.** Évaluer l'énergie d'activation de la réaction à l'aide du graphe d'Arrhénius et vérifier la cohérence avec l'expression proposée pour  $k_{app}$ .
- Q33.** À l'aide des valeurs des flux de matière impliqués dans le réacteur, évaluer la vitesse de formation de l'EGMBE (en  $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ ) dans les conditions du **document 7**. Comparer au résultat de la **question Q31** et conclure sur la validité de la modélisation de la cinétique au sein du réacteur.

## Partie IV - L'EGMBE : des problèmes et des alternatives

La réaction envisagée dans le **document 7** pose néanmoins un problème d'oligomérisation : on ne peut pas complètement empêcher la formation de molécules de formule générale



**Q34.** Indiquer qualitativement l'effet de l'allongement de la chaîne sur la viscosité du solvant en raisonnant sur les interactions entre les chaînes.

**Q35.** La présence d'oligomères peut constituer un problème pour l'utilisation de l'EGMBE comme solvant dans les peintures. Proposer une explication.

Pour éviter les problèmes d'oligomérisation du procédé de synthèse de l'EGMBE, des alternatives fondées sur la catalyse organométallique font l'objet de recherches. L'EGMBE peut ainsi être synthétisé à partir d'éthane-1,2-diol et de buta-1,3-diène comme présenté dans le **document 10**, annexe documentaire, page 12.

**Q36.** À l'aide du **document 9**, justifier que, sous contrôle frontalier, l'addition concertée de la liaison O-H d'un alcool sur une des liaisons C=C du but-1,3-diène n'est pas possible.

**Q37.** Un mécanisme possible pour la réaction proposée dans le **document 10** consiste en un cycle catalytique dont la première étape à partir du catalyseur est une addition oxydante d'une des liaisons O-H du diol. Donner l'équation de réaction modélisant cette étape. On pourra noter  $\text{NiL}_n$  le complexe de nickel jouant le rôle de catalyseur.

**Q38.** Expliquer pourquoi une di-hydroalcoxylation est possible avec le butadiène. Donner la structure d'un des produits de di-hydroalcoxylation possibles.

**Q39.** Proposer des conditions expérimentales pour la transformation du produit d'hydroalcoxylation du butadiène en EGMBE.

**Q40.** Proposer une explication au fait qu'on ne puisse pas utiliser l'éthane-1,2-diol à la place de l'époxyéthane dans le procédé du **document 7**.

**Q41.** Lister les améliorations à apporter à la réaction d'alcoxylation pour la rendre plus compétitive.

**Q42.** L'utilisation du butadiène ne permet pas d'accéder directement à l'EGMBE. On pourrait songer à utiliser le but-1-ène à la place. Donner la structure des produits possibles par alcoxylation du but-1-ène par l'éthane-1,2-diol et identifier le produit potentiellement majoritaire vu les résultats obtenus sur le butadiène. Conclure.

**FIN**









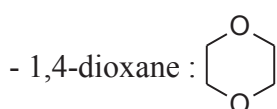
## ANNEXE DOCUMENTAIRE

| <b>Données</b>  |  |   |
|---|--|---|
| <b>Constante physique</b>   |  |   |
| Constante des gaz parfaits : $R = 8,314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$   |  |   |
| <b>Masses molaires</b>  |  |   |
| $M_{\text{H}} = 1 \text{ g.mol}^{-1}$ ; $M_{\text{C}} = 12 \text{ g.mol}^{-1}$ ; $M_{\text{O}} = 16 \text{ g.mol}^{-1}$ |  |   |
| <b>Électronégativité</b>  |  |   |
| $\chi_{\text{C}} = 2,55$ ; $\chi_{\text{O}} = 3,44$   |  |   |
| <b>Température d'ébullition sous 1 bar</b>  |  |   |
|   | <u>T<sub>eb</sub> (K)</u>  |   |
| éthoxyéthane  | 308  |   |
| éthanol   | 351  |   |
| EGMBE   | 444  |   |
| eau   | 373  |   |
| acide sulfurique  | 610*   |   |
| *décomposition  |  |   |
| <b>Température d'ébullition sous 2 bars</b>   |  |   |
|   | <u>T<sub>eb</sub> (K)</u>  |   |
| époxyéthane   | 300  |   |
| butan-1-ol  | 410  |   |
| EGMBE   | 470  |   |
| <b>Grandeurs thermodynamiques (à 298 K le cas échéant)</b>  |  |   |
|   | <u><math>\Delta_{\text{f}}H^{\circ}</math> (kJ.mol<sup>-1</sup>)</u> | <u><math>S^{\circ}</math> (J.K<sup>-1</sup>.mol<sup>-1</sup>)</u> |
| CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH <sub>(l)</sub>   | - 277,4  | 159,9   |
| (CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> O <sub>(l)</sub>  | - 271,2  | 253,5   |
| (CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> O <sub>(g)</sub>  | - 252,7  | 342,2   |
| H <sub>2</sub> C=CH <sub>2(g)</sub>   | 52,47  | 219,3   |
| H <sub>2</sub> O <sub>(l)</sub>   | - 285,8  | 69,95   |
| $\Delta_{\text{f}}H^{\circ}$ : enthalpie standard de formation ; $S^{\circ}$ : entropie molaire standard absolue        |  |   |
| <b>Volumes molaires à 298 K</b>   |  |   |
| $V_{\text{m}}(\text{H}_2\text{O}_{(l)}) = 18 \text{ mL.mol}^{-1}$   |  |   |
| $V_{\text{m}}(\text{éther}_{(l)}) = 103 \text{ mL.mol}^{-1}$  |  |   |

## Document 1 - Propriétés de quelques solvants

|                    | $\mu$ (D) | $\epsilon_r$ | $T_{eb}$ (°C) |
|--------------------|-----------|--------------|---------------|
| 1,4-dioxane        | 0,45      | 2,3          | 101           |
| éther*             | 1,15      | 4,3          | 35            |
| éthanol            | 1,69      | 24           | 79            |
| acétate de méthyle | 1,72      | 6,9          | 57            |
| THF                | 1,75      | 7,5          | 66            |
| acétate d'éthyle   | 1,78      | 6            | 77            |
| eau                | 1,85      | 80           | 100           |
| DMF                | 3,82      | 38           | 153           |
| DMSO               | 3,96      | 47           | 189           |

$\mu$  : moment dipolaire ;  $\epsilon_r$  : constante diélectrique relative ;  $T_{eb}$  : température d'ébullition



- (\*) Le terme « éther » désigne ici l'éthoxyéthane, connu aussi sous le nom d'éther diéthylique ou oxyde de diéthyle :  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-CH}_2\text{-CH}_3$
- THF : tétrahydrofurane
- DMF : diméthylformamide
- DMSO : diméthylsulfoxyde

## Toxicologie

éther diéthylique



H224 - Liquide et vapeurs extrêmement inflammables  
H302 - Nocif en cas d'ingestion  
H336 - Peut provoquer somnolence ou vertiges  
EUH 019 - Peut former des peroxydes explosifs  
EUH 066 - L'exposition répétée peut provoquer dessèchement ou gerçures de la peau

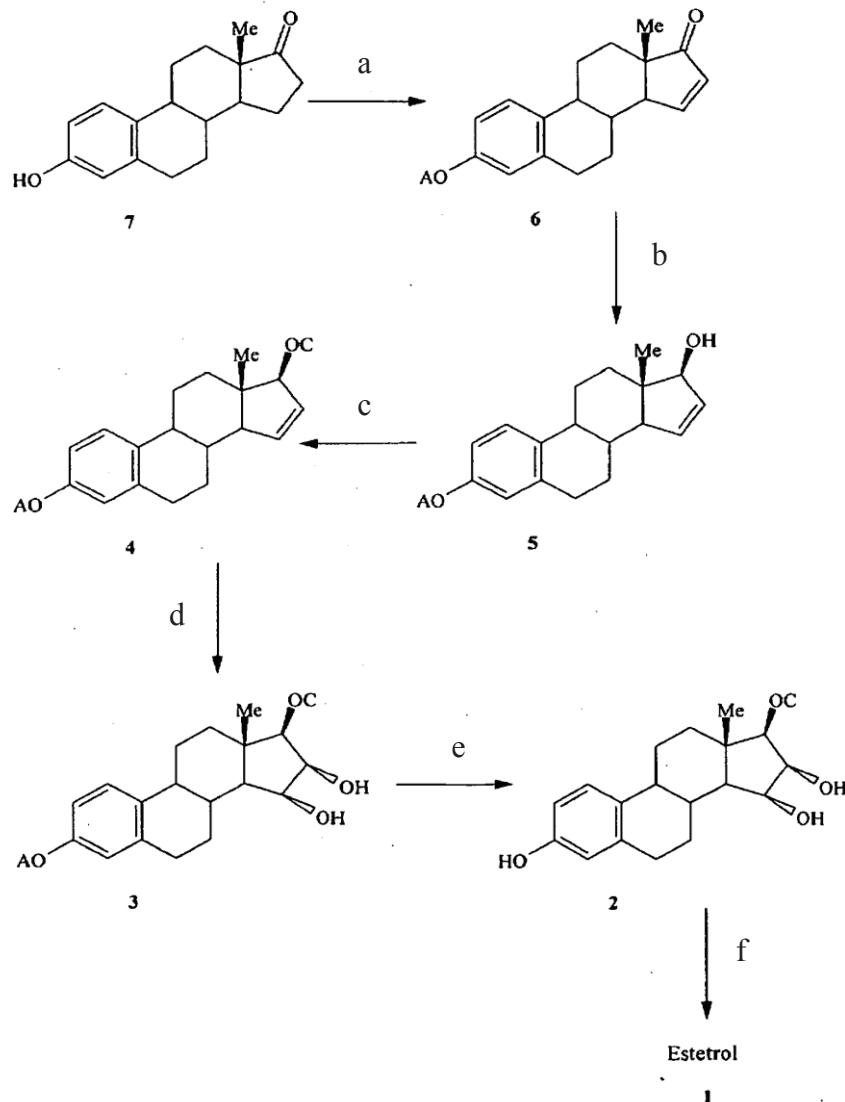
tétrahydrofurane (THF)



H225 - Liquide et vapeurs très inflammables  
H319 - Provoque une sévère irritation des yeux  
H335 - Peut irriter les voies respiratoires  
H351 - Susceptible de provoquer le cancer  
EUH 019 - Peut former des peroxydes explosifs

Sources : fiches toxicologiques INRS & <https://fr.wikipedia.org/wiki/Solvant>

## Document 2 - Étapes de synthèse de l'estetrol



A et C sont des groupes protecteurs.

La connaissance de la formule de l'estetrol n'est pas nécessaire pour répondre à la **question 8**.

Source : brevet EP1562976 B1 (2010)

### Document 3 - Déshydratation des alcools

En 1540, Valerius Cordus propose une synthèse de ce qu'on appelle alors l'huile douce de vitriol, qui n'est autre que notre éthoxyéthane. Il procède par distillation d'un mélange d'huile de vitriol (acide sulfurique) et d'esprit de vin (éthanol). Henri Louis Duhamel du Monceau améliore le procédé dans les années 1740. La synthèse peut se résumer par l'équation de réaction suivante :



Un équilibre de changement d'état peut s'établir selon la température envisagée :



On parle aujourd'hui de déshydratation intermoléculaire des alcools, par opposition à la réaction de déshydratation intramoléculaire des alcools dont on donne l'exemple ci-dessous dans le cas de l'éthanol :



Dans les deux cas, l'acide sulfurique joue un rôle de catalyseur.

Source : Jean Boulaine et Jean-Paul Legros, *D'Olivier de Serres à René Dumont. Portraits d'agronomes*, TEC & DOC Lavoisier, 1998

## Document 4 - Propriétés physiques de quelques mélanges

### Éthoxyéthane-eau

L'éthoxyéthane et l'eau sont non miscibles.

### Éthanol-eau

L'éthanol et l'eau sont miscibles en toutes proportions. Le mélange présente un azéotrope pour une fraction molaire de 0,11 en éthanol, à une température de 78,3 °C sous P°.

Source : Handbook of Chemistry and Physics

### Éthanol-eau-éthoxyéthane

Coefficient de partage à 298 K :

$$P_{\text{ether-eau}}(\text{éthanol}) = \frac{[\text{éthanol}]_{\text{ether}}}{[\text{éthanol}]_{\text{eau}}} \approx 0,28$$

Source : C. Ackermann *et al.* International Journal of Pharmaceutics 36, 1987, 67

### EGMBE-eau

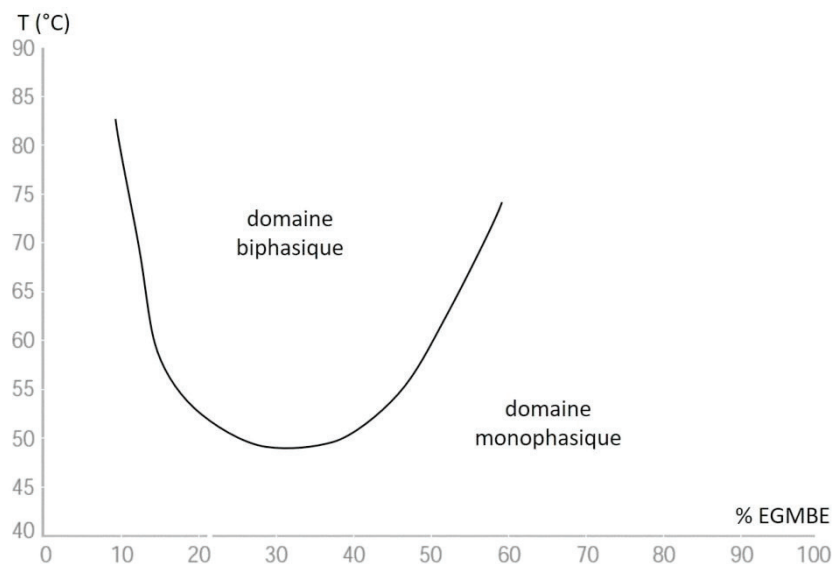


Diagramme de phase liquide-liquide (% massique)

Source : GlycolEthers – fiche technique DOW Chemicals 2017

## Document 5 - EGMBE : toxicologie

2-butoxyéthanol (EGMBE)

H332 - Nocif par inhalation

H312 - Nocif par contact cutané

H302 - Nocif en cas d'ingestion

H319 - Provoque une sévère irritation des yeux

H315 - Provoque une irritation cutanée

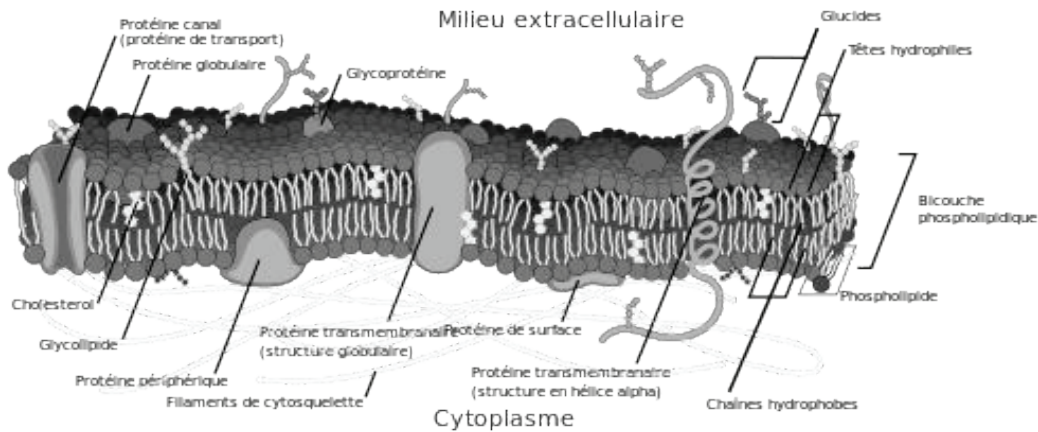


L'EGMBE est nocif par contact cutané avec une vitesse de pénétration comprise entre 7 et 96 nmol.cm<sup>-2</sup>.h<sup>-1</sup>.

Sources : fiche toxicologique INRS

## Document 6 - Un peu de biochimie

### Structure des membranes cellulaires



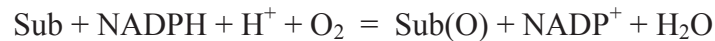
Source : wikimedia commons 2017

Les membranes cellulaires sont des assemblages souples de phospholipides qui ensèrent diverses structures protéiques. L'ensemble est en mouvement permanent.

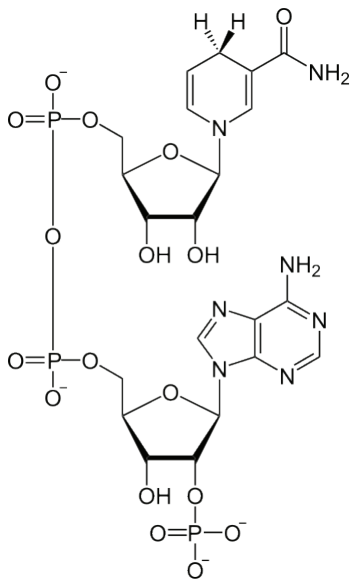
Les phospholipides qui constituent la majeure partie de la membrane sont des molécules amphiphiles dont les chaînes hydrophobes se regroupent au cœur de la membrane, tandis que les têtes polaires font l'interface avec la phase aqueuse du milieu extracellulaire d'un côté et celle du cytoplasme de l'autre.

### Cytochrome P-450

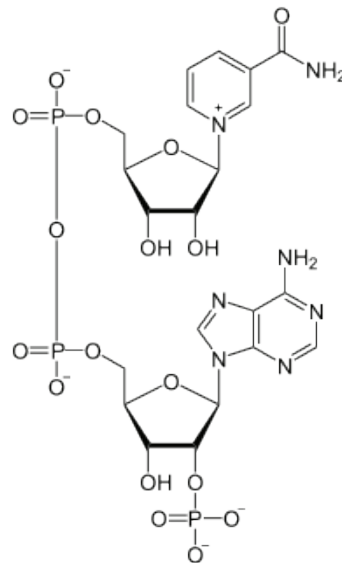
L'organisme a la capacité d'éliminer des substrats exogènes Sub (*i.e.* issus de l'environnement) en procédant à leur oxydation en Sub(O) par mono-oxygénation *via* des enzymes à l'aide d'un co-réducteur (NADPH) :



NADPH :



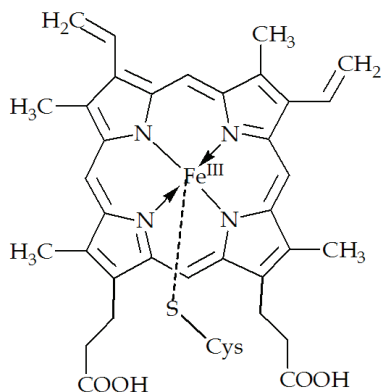
NADP<sup>+</sup> :



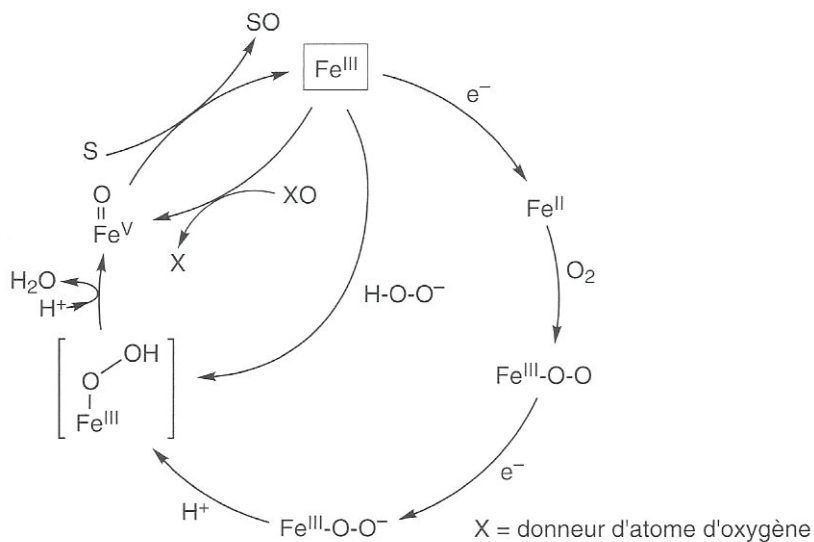
Le cytochrome P-450 est une enzyme de type mono-oxygénase à base de fer : la chaîne protéique ensère un complexe fer-porphyrine ; le nombre d'oxydation du fer varie en fonction des ligands qui viennent s'ajouter à la porphyrine.

**Document 6 (suite) - Un peu de biochimie**

Complexe fer-porphyrine-thiolate au sein du cytochrome P-450 :



Implication du cytochrome P-450 comme mono-oxygénase :

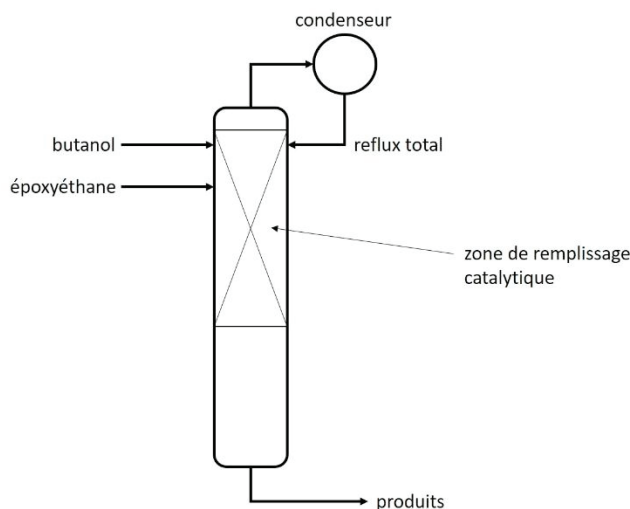
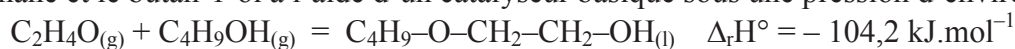


**Mécanisme d'oxydation d'un substrat S par le cytochrome P-450, un complexe fer-protoporphyrine IX comportant un ligand axial thiolate cystéine**

Source : Chimie organométallique, D. Astruc, EDP Sciences, 2000

## Document 7 - Production de l'EGMBE

Une voie de synthèse de l'EGMBE (2-butoxyéthanol) consiste à faire réagir en phase gazeuse l'époxyéthane et le butan-1-ol à l'aide d'un catalyseur basique sous une pression d'environ 2 bars :



La réaction est mise en œuvre dans un réacteur ouvert qu'on peut schématiser comme indiqué ci-contre. Le catalyseur est immobilisé sur une phase solide remplissant la partie haute du réacteur.

Les réactifs sont introduits en proportions stœchiométriques sous forme liquide et se vaporisent dans la zone de réaction. Les réactifs en phase vapeur non consommés sont recyclés par un condenseur en haut du réacteur. Les produits sont récupérés sous forme liquide en bas du réacteur avec un débit de  $0,178 \cdot 10^3 \text{ mol.h}^{-1}$ .

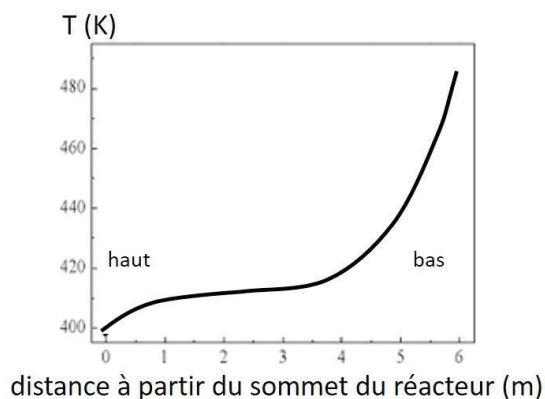
Caractéristiques du réacteur :

Hauteur : 6 m

Hauteur de la zone catalytique : 3 m

Volume disponible pour les gaz :  $0,039 \text{ m}^3$

Profil de température au sein du réacteur :



Étude cinétique :

La loi de vitesse expérimentale pour la formation de l'EGMBE a pu être établie ; elle prend la forme suivante :

$$v_{EGMBE} = k_{app} [\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}] [\text{C}_2\text{H}_4\text{O}]$$

avec

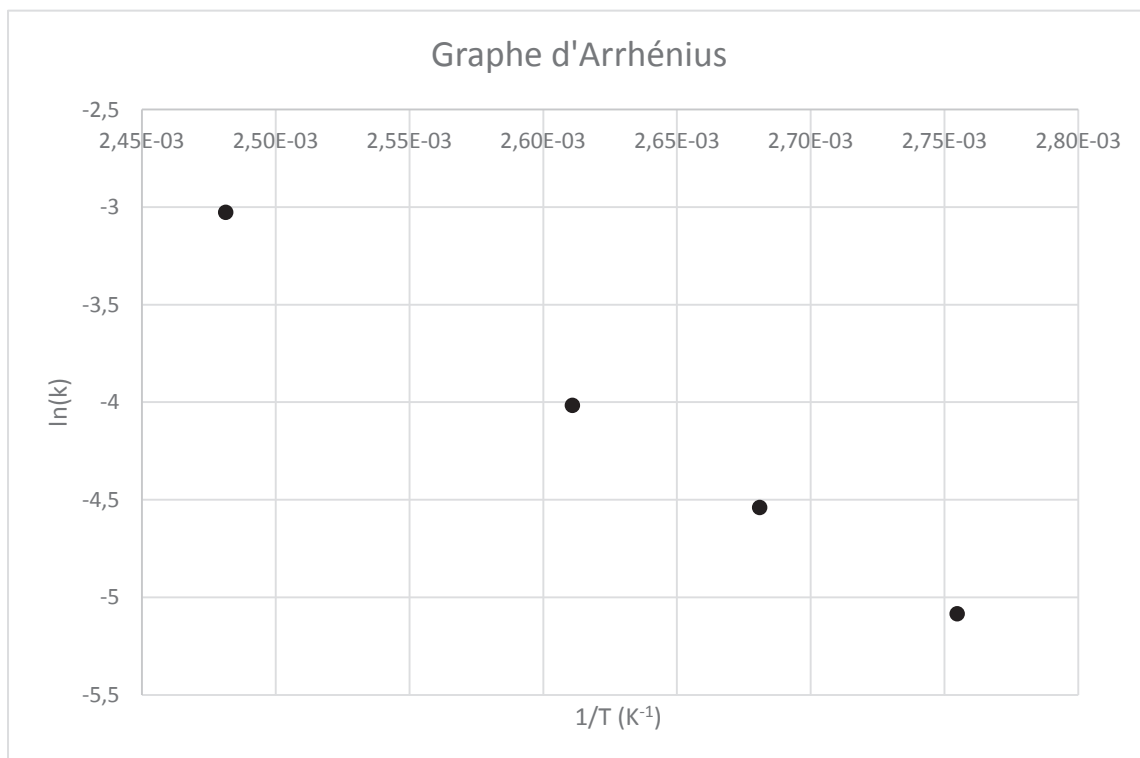
$$k_{app} = 3,47 \cdot 10^6 \cdot e^{\frac{-73\,016}{RT}}$$

(avec T en K, pour une vitesse exprimée en  $\text{mol.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$  et des concentrations en  $\text{mol.m}^{-3}$ ).



## Document 7 (suite) - Production de l'EGMBE

Cette dernière expression, proportionnelle à la constante de vitesse  $k$  intrinsèque (indépendante de la concentration du catalyseur), a été déterminée à partir d'expériences en réacteur semi-ouvert (où seul l'époxyéthane est introduit progressivement) : elle est issue d'une série de mesures à différentes températures dont les résultats sont donnés ci-dessous.

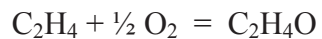


Source : W.Z.An, F.L.Dong, Z.B.Liu, J.M.Zhu, Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities 22(4): 611-617, **2008** & W.Z. An, X. Meng, D.W. Bi, J.M. Zhu, Proceedings of the 11th International symposium on Process Systems Engineering, Singapore **2012**

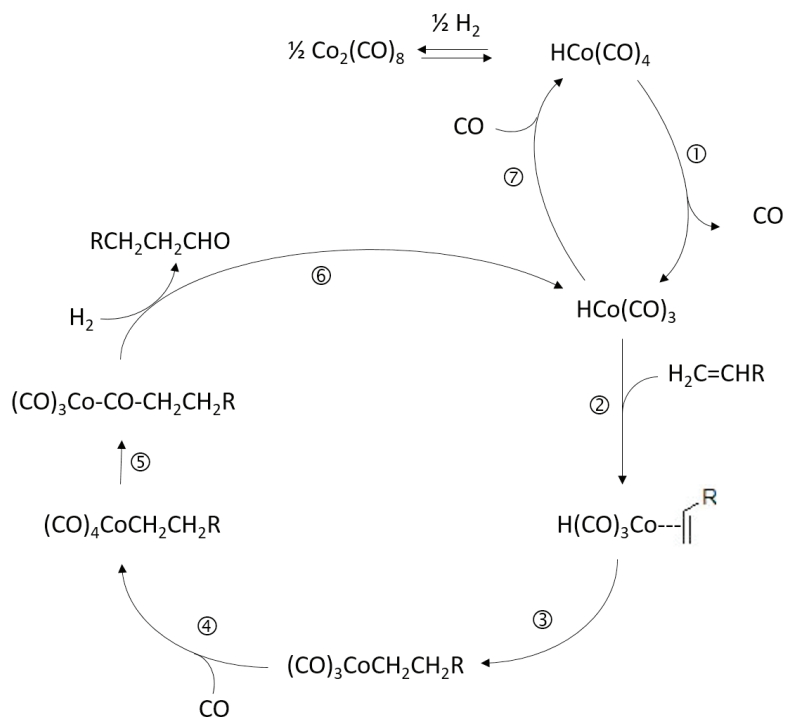
## Document 8 - Quelques réactions des alcènes

### Oxydation de l'éthène

L'argent métallique, déposé sur de l'alumine sous forme de particules finement divisées, permet l'oxydation de l'éthène en époxyéthane en phase gazeuse :



### Hydroformylation



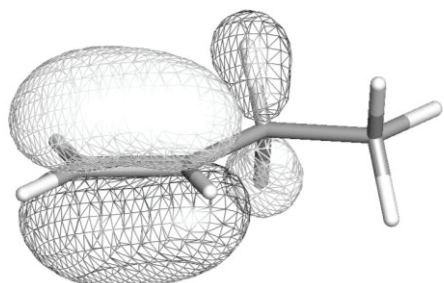
## Document 9 - Orbitales atomiques et moléculaires

### Cobalt

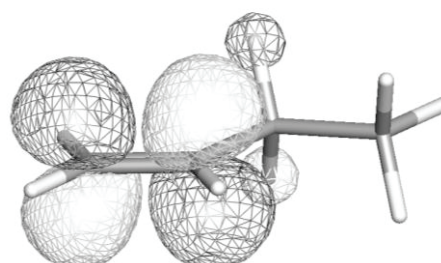
$E(3d) = -7,54 \text{ eV}$

### But-1-ène

HO (-14,79 eV)

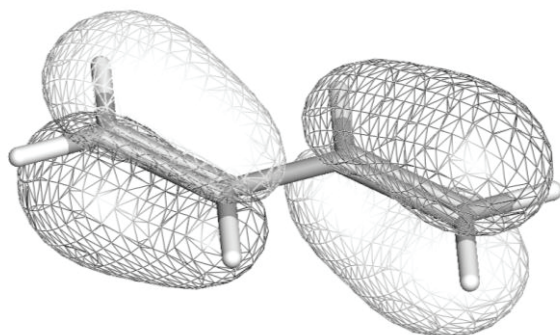


BV (1,43 eV)

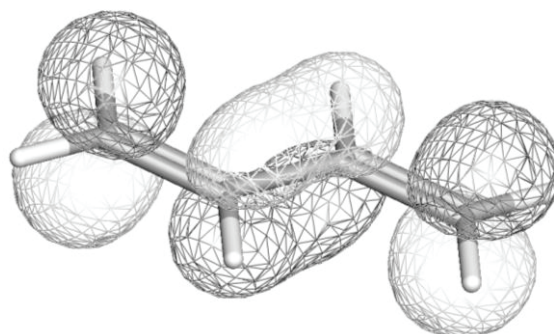


### But-1,3-diène

HO (-13,67 eV)

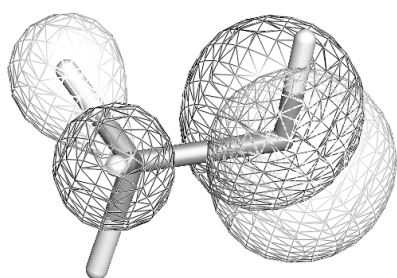


BV (-1,96 eV)

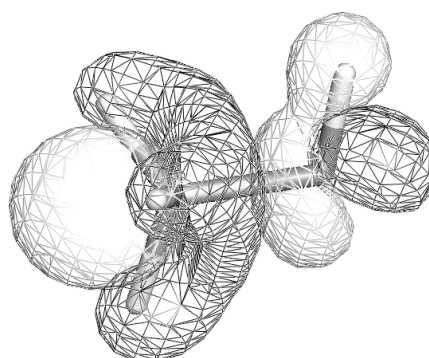


### Méthanol

HO (-12,88 eV)



BV (31,39 eV)

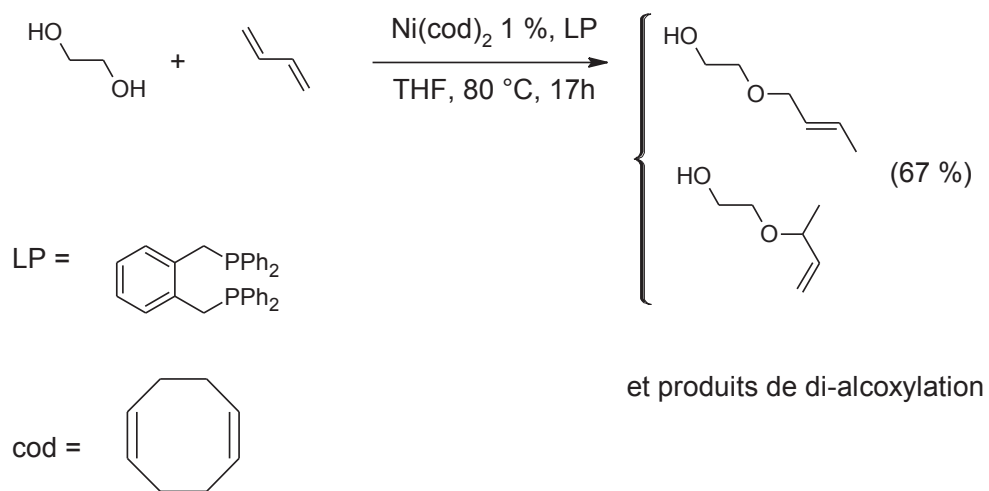


HO : orbitale moléculaire la plus haute occupée ; BV : orbitale moléculaire la plus basse vacante  
Les énergies des orbitales sont données entre parenthèses.

Calculs : Jimp2 - Hall, M. B.; Fenske, R. F. *Inorg. Chem.* **1972**, *11*, 768-779. Bursten, B. E.; Jensen, J. R.; Fenske, R. F. *J. Chem. Phys.* **1978**, *68*, 3320. Manson, J.; Webster, C. E.; Pérez, L. M.; Hall, M. B.  
<http://www.chem.tamu.edu/jimp2/index.htm>

## Document 10 - EGMBE : une nouvelle voie de synthèse

### Hydroalcoxylation du butadiène



Source : A. Mifleur *et al.* L'Actualité Chimique, 408-409, 2016, 126