

On va utiliser dans ce TP l'app en ligne [MolView](#) qui permet de visualiser des structures chimiques en 3D. En cliquant sur le lien, un popup vous invite à essayer leur nouvelle application, vous déclinerez poliment en cliquant sur « close popup ».

• Le chlorobenzène

Dans la fenêtre de tracé 2D, cliquer d'abord sur l'icône poubelle pour repartir d'une page vierge.

Vous allez ensuite construire la molécule de benzène C_6H_6 en utilisant le raccourci sur le côté de la fenêtre. Cliquer sur l'icône « C-H » au-dessus de la fenêtre de tracé pour afficher les liaisons hydrogène puis sur l'icône balai pour un affichage propre et enfin sur l'icône cible pour adapter le zoom.

Remplacer maintenant un des atomes d'hydrogène par un atome de chlore pour obtenir une molécule de chlorobenzène.

Cliquer ensuite sur « 2D to 3D » pour obtenir l'affichage 3D de la molécule.

1. Quelle liaison covalente de la molécule de chlorobenzène peut-elle être considérée comme polarisée ? Justifier.

Données :

- électronégativité (échelle de Pauling) de quelques atomes :

$$\chi(C) = 2,55, \chi(H) = 2,2, \chi(Cl) = 3,16$$

Type de liaison	$ \Delta\chi $
covalente apolaire	$ \Delta\chi < 0,5$
covalente polaire	$0,5 \leq \Delta\chi < 1,7$
ionique	$1,7 \leq \Delta\chi $

2. Représenter le schéma de Lewis de la molécule et ajouter des charges partielles δ^- et δ^+ où elles sont présentes.
3. Le barycentre (ou moyenne géométrique) des charges partielles négatives est-il confondu avec celui des charges positives ? En déduire si la molécule de chlorobenzène est polaire.

Dans le menu tout en haut, vous pouvez cliquer sur le sous-menu Jmol puis sur « Bond dipoles » pour afficher un vecteur représentant la polarisation des liaisons et sur « Overall dipole » pour un vecteur (jaune) représentant la polarisation totale de la molécule.

- **Le 1,2-dichlorobenzène**

On numérote les carbones du cycle en partant de 1 pour celui qui est lié au chlore jusqu'à 6 de proche en proche (le sens n'est pas important).

Remplacer l'atome d'hydrogène par un atome de chlore sur le carbone n°2. On crée ainsi le 1,2-chlorobenzène.

4. Représenter le schéma de Lewis de la molécule et ajouter des charges partielles δ^- et δ^+ où elles sont présentes.
5. La molécule produite est-elle polaire ?

- **Le 1,4-dichlorobenzène**

Remettre un atome d'hydrogène à la place de l'atome de chlore sur le carbone n°2 et remplacer un atome d'hydrogène par un atome de chlore sur le carbone n°4 pour obtenir le 1,4-dichlorobenzène.

6. Représenter la molécule et ajouter des charges partielles δ^- et δ^+ où elles sont présentes.
7. La molécule produite est-elle polaire ?

8. En allant sur wikipedia ou d'autres sources (sur MolView, vous pouvez afficher les informations d'une molécule en allant sur « Tools -> PubChem source »), compléter le tableau suivant.

	1,2-dichlorobenzène	1,4-dichlorobenzène
Formule brute		
Polarité		
Pictogrammes		
État physique à T et P ambiante		
Couleur		
Odeur		
Masse volumique		
Solubilité dans l'eau		
Température de fusion		
Température d'ébullition		