

Le Benzène

URL source du document

<http://pedagogie.ac-montpellier.fr:8080/Disciplines/scphysiques/academie/ABCDorga/Famille/BENZENE.htm>

LE BENZENE: questionnaire

- 1) formule brute
- 2) formule générale
- 3) représentation 3D
- 4) propriétés physiques
- 5) propriétés chimiques (combustions, oxydations, additions)
- 6) substitutions électrophiles
- 7) résumé

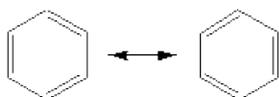
Réponses:

1) Formule brute: C_6H_6

2) Formule générale :

On peut adopter la représentation de Kékulé:

Cette représentation est commode pour montrer les mécanismes réactionnels.

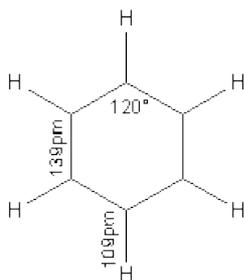


Il n'est pas possible d'isoler ces deux formes (mésomérie): l'équilibre n'existe pas, on ne peut considérer qu'une double liaison existe entre deux carbones adjacents.

L'énergie de résonance (entre le benzène et un hypothétique cyclohexatriène à doubles liaisons figées) qui renseigne sur la stabilité de la molécule, est élevée (environ 150kJ/mol^{-1}).

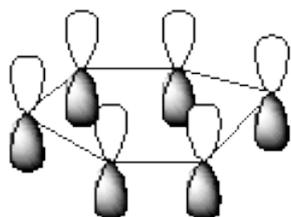
3) Représentation (3D)

[Compacte](#) [Eclatée](#)



Molécule plane,

les 6 carbones sont en état d'hybridation sp^2 (angles de 120°) avec recouvrement latéral des orbitales non hybridées $2p_z$:



Les électrons non appariés sont délocalisés sur l'ensemble des 6 atomes de carbone du cycle; les molécules possédant ce cycle sont des molécules à noyau benzénique; on dit qu'elles sont aromatiques.

4) Propriétés Physiques:

Masse molaire : $78,12 \text{ g.mol}^{-1}$

T d'ébullition: $80,1^\circ\text{C}$

T de fusion: $5,5^\circ\text{C}$

Densité: $0,8765^{20/4}$

Indice de réfraction: $1,5011^{20}$

Solubilité: éthanol, acétone, éther, acide acétique

Risque: Facilement inflammable et Toxique (R: 45-11-48/23/24/25 S: 53-16-29-44)

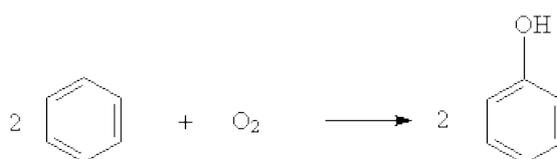
5) Propriétés chimiques :

5-1) Combustion dans l'air:

combustion très incomplète (flamme très fuligineuse)

$\text{C}_6\text{H}_6 + 15/2 \text{ O}_2 \text{ -----} \rightarrow 6\text{CO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$ avec 3344 kJ.mol^{-1} dégagés (fort dégagement de chaleur).

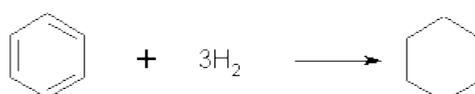
5-2) Oxydation par l'air ou les oxydants:



(700°C pression catalyseur), on aboutit au benzophérol.

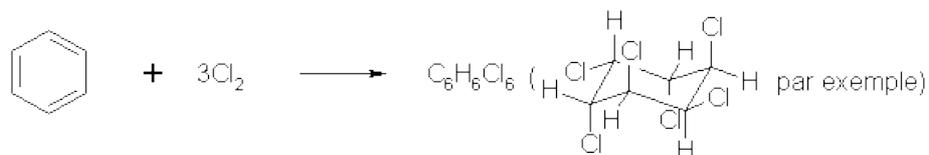
5-3) Additions:

- H_2 :



Il y a addition de 3 molécules de dihydrogène en une seule fois (200°C , Ni réduit).

- Cl₂:



Cette réaction a lieu sous l'action des ultra-violet, à la température ordinaire; le benzène se sature en une seule fois.

Ces réactions d'addition sont beaucoup plus difficiles à réaliser qu'avec les alcènes et les alcynes.

6) Substitutions électrophiles:

c'est l'essentiel des propriétés chimiques du benzène.

6-1) Mécanisme :



C'est **l'intermédiaire de Wheland**;



bilan :



6-2) Halogénéation :

*le dérivé iodé est donné par action de ICl (I⁺ + Cl⁻)

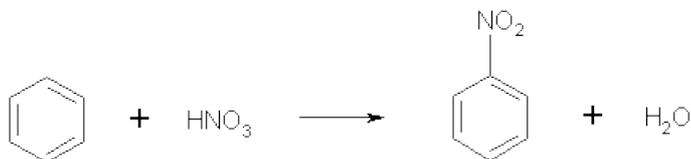
*Dichlore et dibrome même moyen d'action:



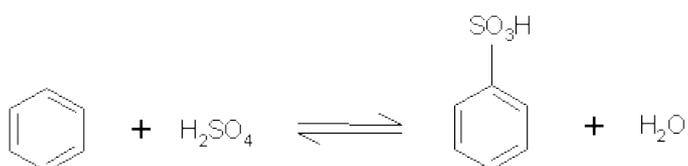
AlCl₃ acide de Lewis permet la formation de l'agent électrophile Cl⁺

6-3) Nitration :

agent électrophile NO_2^+ (formé par réaction de H_2SO_4 sur HNO_3 mais présent aussi dans HNO_3 concentré)

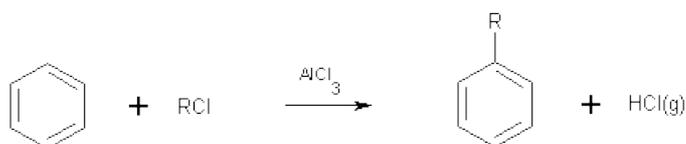


6-4) Sulfonation :

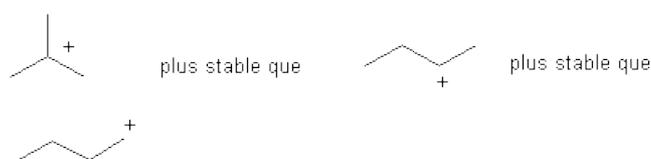


6-5) Réaction de Friedel et Crafts :

* alkylation:

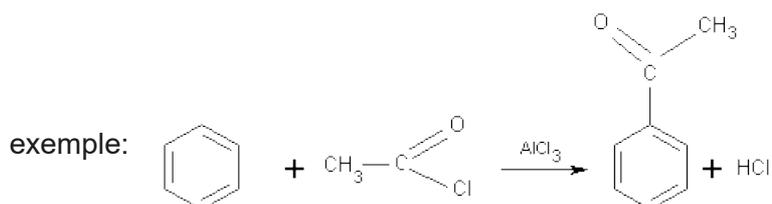


l'agent électrophile est R^+ mais ce carbocation est susceptible de réarrangement interne



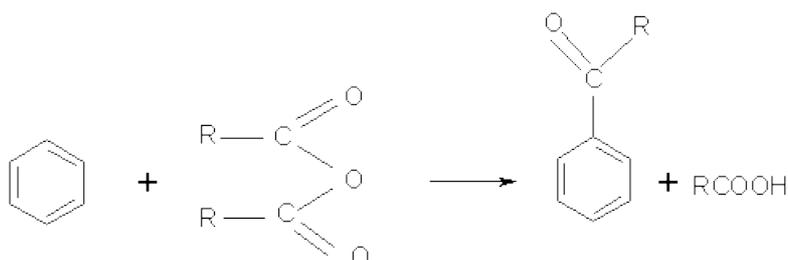
On obtient donc plusieurs isomères et en particulier les plus ramifiés.

Acylation: il s'agit de la fixation d'un groupement acyle R-CO- sur le noyau benzénique



C'est l'ion acylium $R-C(+) = O$ qui est le réactif électrophile.

Autre exemple avec un anhydride d'acide:



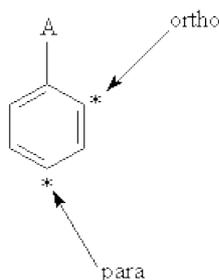
6-6) Polysubstitution; règles de Hollemann :

Le premier substituant d'un noyau benzénique, influe sur la position d'un deuxième substituant. On classe les premiers groupements substitués en 3 catégories:

- première catégorie: -R, -OH, -OR, -NH₂

repoussent les électrons, enrichissent le noyau aromatique et favorisent (ou activent) une deuxième substitution

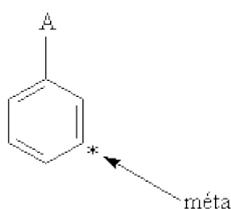
Electrophile.....ils orientent en ortho ou en para:



- deuxième catégorie : -NO₂, -CN, SO₃H, -COOH, -CHO, COOR

attirent les électrons à eux, appauvrissent le noyau aromatique et défavorisent (désactivent) une deuxième substitution

Electrophile.....ils orientent en méta:



- troisième catégorie : les halogènes, ont un caractère défavorisant, donc désactivent une deuxième Substitution Electrophile, mais orientent en ortho ou para.