

# CÁC PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH VẬT LIỆU 1

1

GIỚI THIỆU MÔN HỌC

9/11/2017

## Thông tin giảng viên

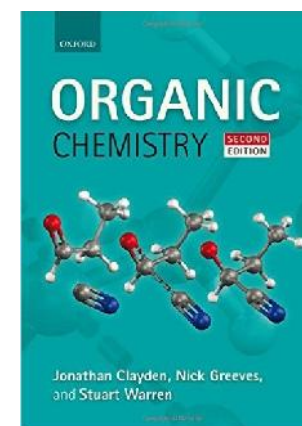
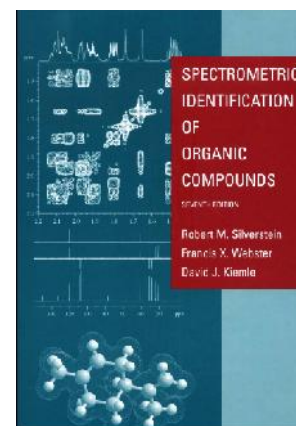
- Nguyễn Thái Ngọc Uyên - Phổ IR, NMR, UV-Vis
- Hoàng thị Đông Quỳ - Phương pháp phân tích nhiệt
- Trần thị Thanh Vân - Quang học & phổ Raman
- VP BM Vật liệu polymer & composite: F400
- Email: [ntnuyen@hcmus.edu.vn](mailto:ntnuyen@hcmus.edu.vn)
- Email subject: K15.Pho nghiem.xxx

## PHẦN 1. PHÂN NGHIỆM

3

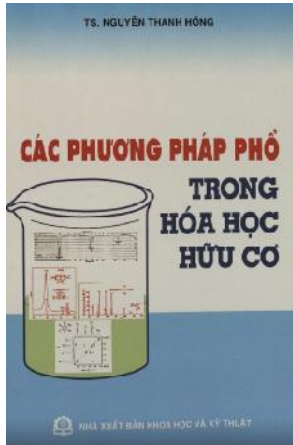
9/11/2017

## TÀI LIỆU THAM KHẢO



4

## TÀI LIỆU THAM KHẢO



Thư viện trường KHTN

5

2 bài kiểm tra = 25%

- Bài KT 1: Phương pháp phân tích quang phổ 10%

- Bài KT 2: Phương pháp phân tích nhiệt 15%

Giữa kỳ: Phương pháp phân tích quang phổ 20% (tự luận)

Cuối kỳ: Tổng hợp 55% (trắc nghiệm + tự luận)

Sinh viên **PHẢI** dự tất cả các bài kiểm tra. Nếu sinh viên vắng bài kiểm tra nào, bài kiểm tra đó sẽ tính **không (0) điểm**, và sẽ cộng vào điểm trung bình môn học

## NỘI DUNG CHI TIẾT

STT	Tên chủ đề
1	Đại cương về cấu trúc nguyên tử, phân tử và các phương pháp phân tích quang phổ
2	Phổ tử ngoại - khả kiến (UV-Vis)
3	Phổ hồng ngoại (IR) và Raman
4	Khối phổ (MS)
5	Phổ cộng hưởng từ hạt nhân (NMR)
6	Kết hợp các phương pháp phổ trong xác định cấu trúc
7	Phương pháp phân tích nhiệt (DSC, DTA, TGA)

CHUYÊN NGÀNH:

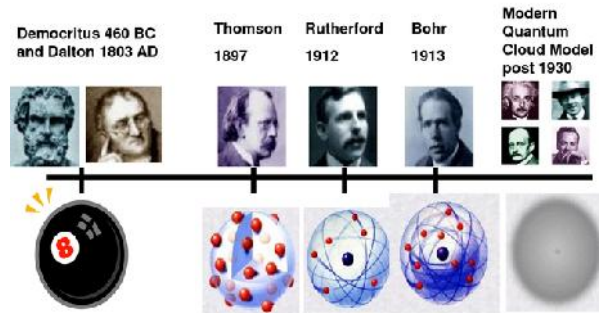
HOÁ HỌC VẬT LÝ VÀ CẤU TRÚC NGUYÊN TỬ, PHÂN TỬ  
SỐ TÍNH NGUYÊN TỬ VÀ VẬT LÝ TÍNH T

9/11/2017

8

## I. C U TRÚC NGUYÊN T

### History of the Atom Timeline



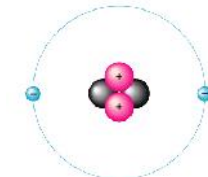
9/11/2017

9

Nguyên tử = hạt nhân (proton + neutron) + electron

#### Điện tích:

- Electron mang điện tích âm
- Proton mang điện tích dương
- Tổng điện tích  $1,6 \cdot 10^{-19}$  Coulombs
- Neutron không mang điện



Nguyên tử He

#### Khối lượng:

- Khối lượng của proton  $m_p$  và neutron  $m_n$  đều là  $1,67 \cdot 10^{-27}$  kg.
- Khối lượng của electron  $m_e$  là  $9,11 \cdot 10^{-31}$  kg (có thể bỏ qua khi tính khối lượng nguyên tử)

$$\text{Khối lượng nguyên tử (A)} = m_p + m_n$$

- Proton quyết định cho nguyên tử hóa học = số nguyên tử (Z)
- Neutron xác định số khối

9/11/2017

10

### Đơn vị khối lượng nguyên tử - Nguyên tử khối

Đơn vị khối lượng nguyên tử (amu) được định nghĩa bằng 1/12 khối lượng nguyên tử của đồng vị phổ biến nhất của carbon ( $A_C = 12$ )

$$1 \text{ amu} = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

Khối lượng của  $C^{12}$  là 12 amu

- Nguyên tử khối của một nguyên tử là trung bình khối lượng nguyên tử của các đồng vị tồn tại trong tự nhiên của nguyên tố và được tính bằng đơn vị amu/nguyên tử hoặc khối lượng/mol

$$1 \text{ amu/nguyên tử (phân tử)} = 1 \text{ g/mol}$$

Số nguyên tử hay phân tử trong một mol gọi là hằng số Avogadro  $N_A$

$$N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$$

Mật độ của nguyên tử (nguyên tử /cm<sup>3</sup>)

$$= N_A \times \text{khối lượng riêng (g/cm}^3\text{)} / \text{khối lượng mol M (g/mol)}$$

9/11/2017

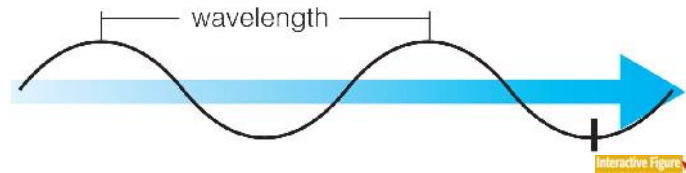
11

### Tính chất của ánh sáng??

Ánh sáng có lưỡng tính sóng, hạt

12

## Đặc tính của sóng



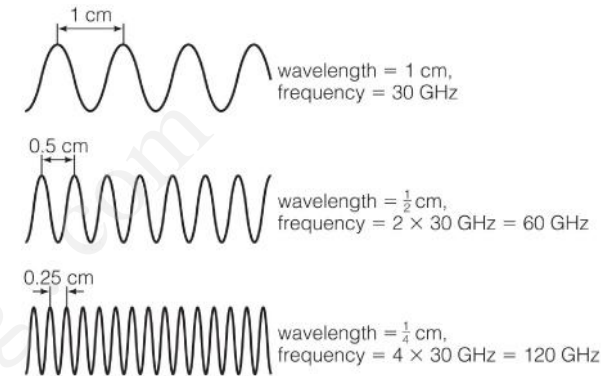
**B** c sóng là khoảng cách giữa 2 đỉnh sóng.

**T** n s là số lần sóng dao động lên và xuống trong 1 giây.

$$V \text{ n t c sóng} = B \text{ c sóng} \times T \text{ n s}$$

13

## Wavelength and Frequency



$$\text{wavelength} \times \text{frequency} = \text{speed of light} = \text{constant}$$

14

## Đặc tính hạt của ánh sáng

Hạt của ánh sáng gọi là **photon**.

Mỗi photon có một bước sóng và một tần số.

Năng lượng của photon phụ thuộc vào tần số của nó.

15

## Wavelength, Frequency, and Energy

$$\lambda \times f = c$$

$\lambda$  = wavelength,  $f$  = frequency

$c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s} = \text{speed of light}$

$$E = h \times f = \text{photon energy}$$

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ joule.s}$$

16





### Electron trong nguyên tử

Electron chuyển động xung quanh hạt nhân với bán kính khoảng 0.05 - 0.2 nm

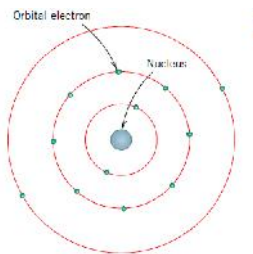
### Mô hình nguyên tử Bohr:

- Electron chuyển động xung quanh hạt nhân trên những orbital gián đoạn.
- Năng lượng của electron là gián đoạn.
- Mỗi electron có một giá trị năng lượng xác định và electron có thể thay đổi năng lượng bằng cách hấp thụ hoặc bức xạ năng lượng.
- Các mức năng lượng này liên quan đến số mức năng lượng hay sự trạng thái của nguyên tử và xác định vị trí của electron trong nguyên tử (orbital điện tử) và năng lượng (các mức năng lượng lượng tử)

9/11/2017

18

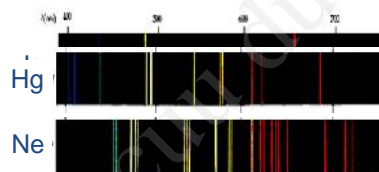
### Mô hình nguyên tử Bohr:



Mô hình Bohr của nguyên tử C

Bán kính của orbital có phép =  $n^2 \times (0.0529 \text{ nm})$

### Phổ vạch của nguyên tử



9/11/2017

19

### Số sóng - hằng số Rydberg

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\epsilon}{c} = R_H \left[ \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

$R_H$  – hằng số Rydberg ( $R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$  hoặc  $1.1 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ )

$n_1: 1, 2, \dots, n_2 > n_1$

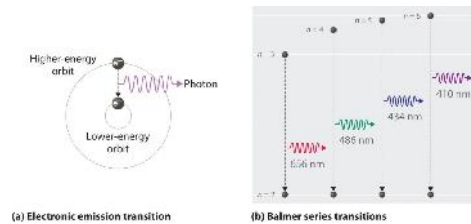
$n_1 = 1$ : dãy Lyman;

$n_1 = 2$ : dãy Balmer;

$n_1 = 3$ : dãy Paschen

20

## Nguyên tử H: mô hình nguyên tử Bohr



$$E_n = -2.18 \times 10^{-18} \left( \frac{1}{n^2} \right) J$$

$$\Delta E = E_f - E_i = E_{\text{cuoi}} - E_{\text{đầu}} = -2.18 \times 10^{-18} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) J$$

$$E_n = n^2 \text{ năng lượng trạng thái } n$$

21

## Các mức năng lượng cho phép trong nguyên tử H

$$E = -2.18 \times 10^{-18} \left( \frac{1}{n^2} \right) J$$

$$\Delta E = -2.18 \times 10^{-18} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) J$$

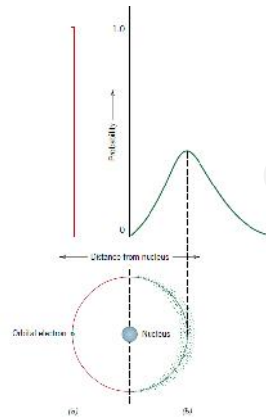
$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \rightarrow \frac{1}{\lambda} = -\frac{2.18 \times 10^{-18}}{hc} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) J$$

$$\frac{1}{\lambda} = -\frac{2.18 \times 10^{-18} J}{(6.626 \times 10^{-34} J \cdot s)(3.00 \times 10^8 m/s)} \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$$= 1.10 \times 10^7 \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) m^{-1} = 1.10 \times 10^5 \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) cm^{-1}$$

22

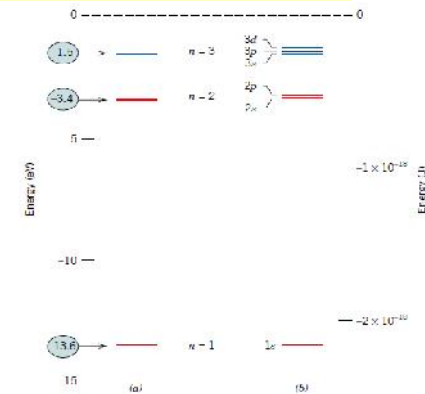
Tuy nhiên, mô hình Bohr không thể giải thích một số hiện tượng liên quan đến nguyên tử.  
 Do đó mô hình cơ học sóng được đưa ra, trong mô hình này electron có tính chất sóng và hạt.  
 Vị trí của electron được mô tả bằng xác suất phân bố của electron hay đám mây điện tử.



9/11/2017

23

Năng lượng trạng thái =  $-C/n^2$  với  $C$  là hằng số Rydberg  
 $n$  = số lượng tử,  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$



- a) Bảng trạng thái năng lượng liên quan đến tiên đề nguyên tử hydro theo Bohr  
 b) Trạng thái năng lượng liên quan đến tiên đề nguyên tử hydro theo mô hình cơ học sóng

24

## S L NG T

- Các s l ng t là k t qu g i p t Schrodinger

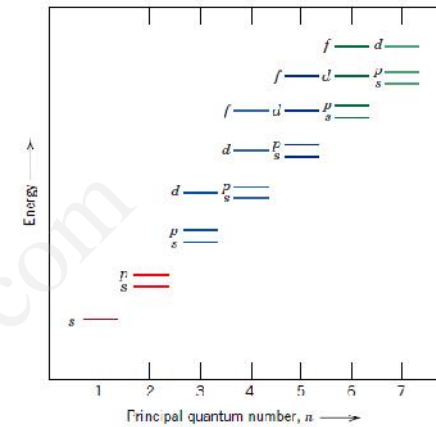
S d ng mô hình c h c sóng, m i electron trong nguyên t c c tr ng b i b n thông s g i là s l ng t (s l ng t chính n (l p), s l ng t ph l (phân l p), s l ng t t m<sub>l</sub> (s tr ng thái n ng l ng c a m i phân l p) và moment spin)

- Nguyên lý lo i tr Pauli: không t n t i 2 electron trong m t nguyên t có cùng các s l ng t

Principal Quantum Number <i>n</i>	Shell Designation	Subshells	Number of States	Number of Electrons	
				Per Subshell	Per Shell
1	K	s	1	2	2
2	L	s	1	2	8
		p	3	6	
3	M	s	1	2	18
		p	3	6	
		d	5	10	
4	N	s	1	2	32
		p	3	6	
		d	5	10	
		f	7	14	

9/11/2017

25



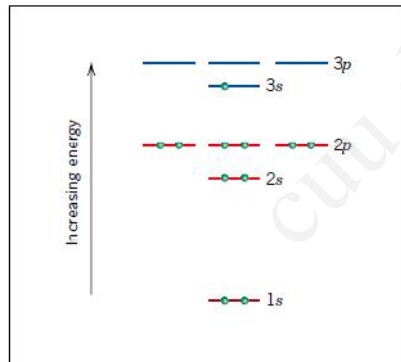
Phân l p theo n ng l ng: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4s, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, ...

Electron l p ngoài cùng là electron hóa tr - liên k t

9/11/2017

26

Electron s l p y nh ng tr ng thái có n ng l ng th p l p và phân l p electron, 2 electron trên m t tr ng thái (2 spin ng c chi u nhau)



S c các tr ng thái n ng l ng c l p y và ch a l p y c a nguyên t Na

9/11/2017

27

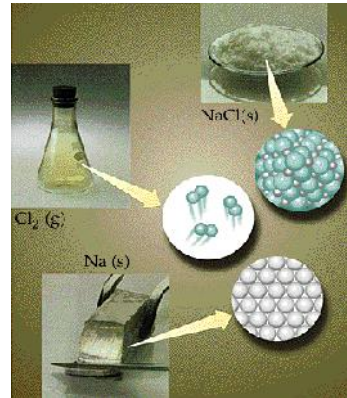
## II. C U TRÚC PHÂN T

9/11/2017

28

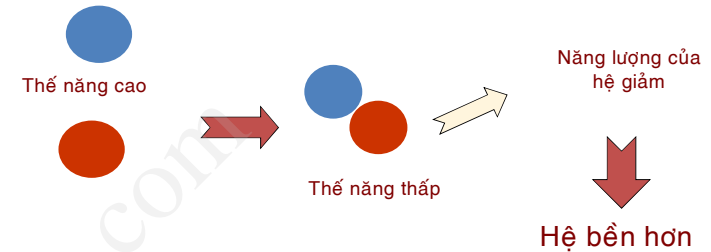
## 1. Khái niệm về liên kết hóa học

Trong tất cả các liên kết hóa học, điện tử được dùng chung và chuyển đổi giữa các nguyên tử.



29

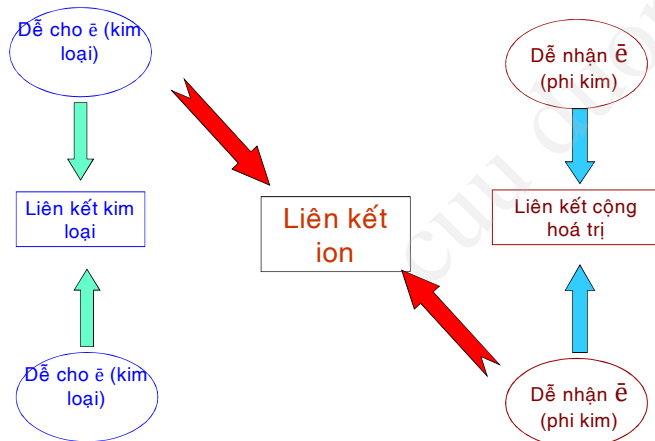
## Tại sao các nguyên tử lại liên kết với nhau?



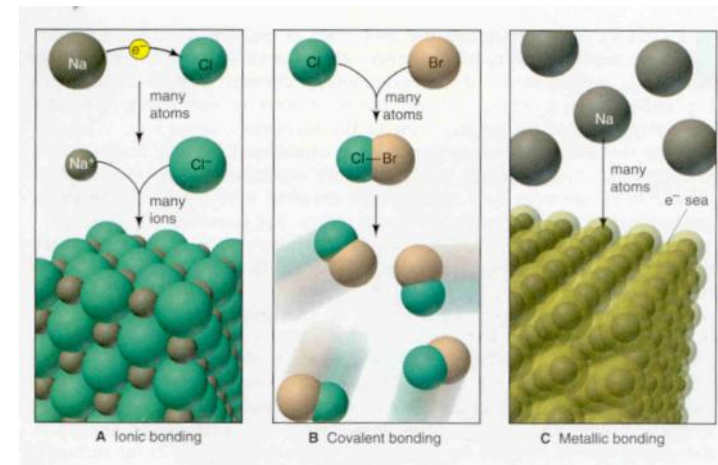
Sự liên kết trong phân tử không đơn giản là sự nối kết các nguyên tử. Khi tạo LKHH luôn có sự giải phóng năng lượng do sự giảm thế năng của hệ các nguyên tử tương tác.

Sự giảm thế năng của hệ là điều kiện tạo thành liên kết hóa học.

30



31



32

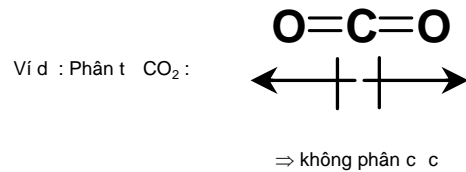




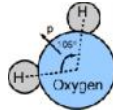
Phân tử phân cực là phân tử có mômen lưỡng cực

Trong một phân tử có nhiều liên kết phân cực, mỗi liên kết có một mômen lưỡng cực.

Mômen lưỡng cực của phân tử bằng tổng vectơ của lưỡng cực liên kết.



Ví dụ: Phân tử  $\text{H}_2\text{O}$ :



9/11/2017

37

## Độ phân cực của liên kết và độ âm điện

Hiệu độ âm điện giữa hai nguyên tử tương tác giúp đánh giá về độ phân cực của liên kết:

Hiệu độ âm điện gần bằng 0 - Liên kết cộng hóa trị không phân cực (điện tử lk được dùng chung như nhau);

Hiệu độ âm điện gần bằng 2 - Liên kết cộng hóa trị phân cực (điện tử lk được dùng chung khác nhau);

Hiệu độ âm điện gần bằng 3 - Liên kết ion (có sự chuyển dời điện tử).

**Không có ranh giới rõ ràng giữa các loại liên kết**

Đầu dương (cực) biểu diễn bằng ký hiệu  $\delta+$  và cực âm là  $\delta-$ .

38

## CÁC DẠNG LIÊN KẾT HÓA HỌC

**Liên kết ion:** electron di chuyển từ nguyên tử này sang nguyên tử khác.

**Liên kết cộng hóa trị:** các nguyên tử đóng góp electron vào liên kết.

Dựa vào sự khác nhau về âm điện của các nguyên tử, liên kết trong phân tử có 3 loại:

Cộng hóa trị không phân cực:  $\Delta A < 0.5$

Cộng hóa trị phân cực:  $0.5 < \Delta A < 2.0$

Ion:  $\Delta A > 2.0$

9/11/2017

39

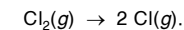
## Độ mạnh của liên kết – Năng lượng liên kết

- Năng lượng cần thiết để **phá vỡ một liên kết** gọi là **năng lượng (enthalpy) phân ly liên kết (nối),  $D$** .

$$D_{A-B} > 0$$

$D_{A-B}$  càng lớn thì nối càng bền.

Td: Với phân tử  $\text{Cl}_2$ ,  $D(\text{Cl}-\text{Cl})$  là  $\Delta H$  của phản ứng:



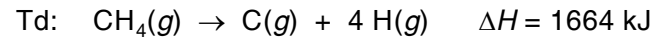
- ĐN khác: **Năng lượng nối  $E_{AB}$**  của liên kết A-B trong phân tử AB là năng lượng được giải phóng ra khi hình thành phân tử AB từ hai nguyên tử A và B đều ở thể khí.  $E_{AB} < 0$ .

$|E_{AB}|$  càng lớn thì nối càng bền.

40

## Năng lượng liên kết

Nếu phá vỡ hơn một liên kết, **năng lượng liên kết thực nghiệm** = trị trung bình của năng lượng phân ly liên kết.



$$D(\text{H}_3\text{C-H}) = 430; D(\text{H}_2\text{C-H}) = 473;$$

$$D(\text{HC-H}) = 422; D(\text{H-C}) = 339$$

$$D(\text{C-H}) = \frac{1}{4}\Sigma\Delta H = \frac{1}{4}(1664 \text{ kJ}) = 416 \text{ kJ}.$$

**Liên kết đa mạnh hơn liên kết đơn.**

	C—C	C=C	C≡C
<i>D</i> , kJ/mol	344	615	812

41

## Năng lượng liên kết

Average Bond Enthalpies (kJ/mol)

### Single Bonds

C—H	413	N—H	391	O—H	463	F—F	155
C—C	348	N—N	163	O—O	146		
C—N	293	N—O	201	O—F	190	Cl—F	253
C—O	358	N—F	272	O—Cl	203	Cl—Cl	242
C—F	485	N—Cl	200	O—I	234		
C—Cl	328	N—Br	243			Br—F	237
C—Br	276			S—H	339	Br—Cl	218
C—I	240	H—H	436	S—F	327	Br—Br	193
C—S	259	H—F	567	S—Cl	253		
		H—Cl	431	S—Br	218	I—Cl	208
Si—H	323	H—Br	366	S—S	266	I—Br	175
Si—Si	226	H—I	299			I—I	151
Si—C	301						
Si—O	368						

### Multiple Bonds

C=C	614	N=N	418	O <sub>2</sub>	495
C≡C	839	N≡N	941		
C=N	615			S=O	523
C≡N	891			S=S	418
C=O	799				
C≡O	1072				

42

## Độ dài liên kết

*khoảng cách giữa hai nhân liên kết trực tiếp*

**Liên kết càng mạnh thì độ dài liên kết càng ngắn.**

- Độ dài liên kết giảm khi bậc liên kết tăng.

	C—C	C=C	C≡C
<i>r</i> , Å	1,54	1,34	1,2

- Số liên kết giữa hai nguyên tử tăng thì liên kết càng mạnh (*D* lớn) và độ dài liên kết càng ngắn.

43

## Năng lượng liên kết và độ dài liên kết

Độ dài liên kết trung bình của một vài liên kết đơn, đôi và ba

Lk	Nođai (Å)	Lk	Nođai (Å)
C—C	1.54	N—N	1.47
C=C	1.34	N=N	1.24
C≡C	1.20	N≡N	1.10
C—N	1.43	N—O	1.36
C=N	1.38	N=O	1.22
C≡N	1.16		
C—O	1.43	O—O	1.48
C=O	1.23	O=O	1.21
C≡O	1.13		

44

## LIÊN KẾT HÓA HỌC

Cơ học lượng tử giải thích sự hình thành liên kết và cấu trúc không gian của phân tử như thế nào?

Các orbital tham gia vào liên kết như thế nào?

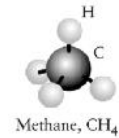
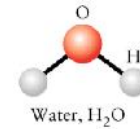
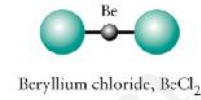


Thuyết liên kết cộng hoá trị (VB)  
Thuyết vân đạo phân tử (MO)

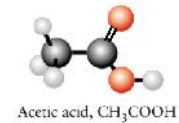
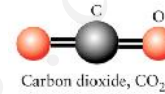
45

### c) Liên kết đơn và liên kết bội – Liên kết $\uparrow$ và $f$

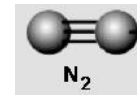
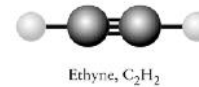
Liên kết đơn:



Liên kết đôi:



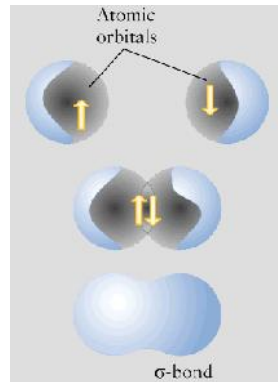
Liên kết ba:



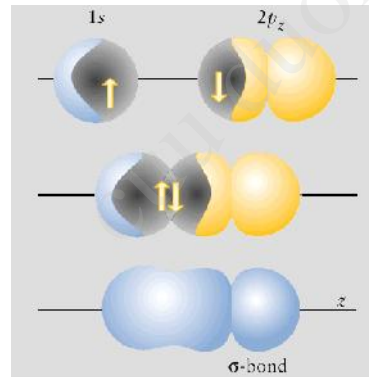
46

### Liên kết $\uparrow$ : xen phủ dọc theo trục liên kết, mật độ $e^-$ trên đường

nối hai tâm luôn khác 0.



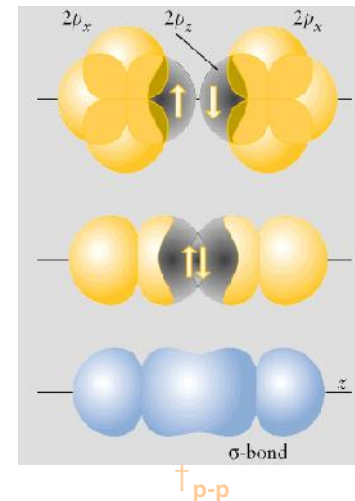
$\uparrow_{s-s}$



$\uparrow_{s-p}$

47

### Liên kết $\uparrow$



✓ Mây điện tử liên kết đối xứng quay xung quanh trục liên kết.

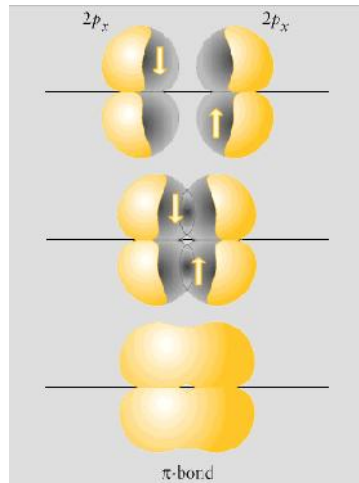
✓ Trong điều kiện như nhau (AO cùng lớp ...) thì độ bền tăng theo đây:

$$\uparrow_{s-s} < \uparrow_{s-p} < \uparrow_{p-p}$$

Mọi lk đơn đều là lk  $\uparrow$

48

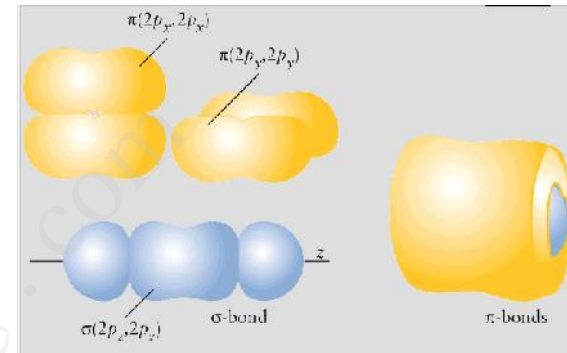
### Liên kết đôi - liên kết $f$



- ✓ Liên kết  $f$  tạo bởi hai AO  $p$  định hướng vuông góc với trục liên kết.
- ✓ Mây điện tử liên kết  $f$  có mặt phẳng đối xứng chứa trục liên kết.
- ✓ Trong cùng điều kiện, liên kết  $f$  kém bền hơn liên kết  $\uparrow$ .
- ✓ Liên kết  $f$  chỉ được tạo thành khi giữa hai ngử tương tác đã hình thành một liên kết  $\uparrow$ .

49

### Liên kết ba: Phân tử $N_2$



Liên kết tam N—N bao gồm 1 lk  $\uparrow$  2 lk  $f$ .

Trong liên kết bội chỉ có 1 liên kết  $\uparrow$  duy nhất

### Kết luận

- Orbital lai hóa là tổ hợp tuyến tính của các AO.
- Các orbital tham gia lai hóa phải có năng lượng không khác nhau nhiều.
- Trạng thái lai hóa là trạng thái suy biến.
- Số orbital lai hóa bằng số orbital nguyên tử tham gia lai hóa.
- Các orbital lai hóa mô tả trạng thái đặc biệt của ngử khi hình thành lk. Liên kết tạo bởi orbital lai hóa bền vững hơn lk tạo bởi AO không lai hóa.

51

### b) Các dạng lai hóa

#### $sp$ , lai hóa thẳng:

- Tổ hợp tt của 1 AO  $s$  và 1 AO  $p$  ã 2 AO lai hóa  $sp$
  - Trục của 2 AO lai hóa  $sp$  nằm trên một đường thẳng
- Td:  $BeX_2$ ,  $ZnX_2$ ,  $CO_2$ ,  $C_2H_2$ , ...

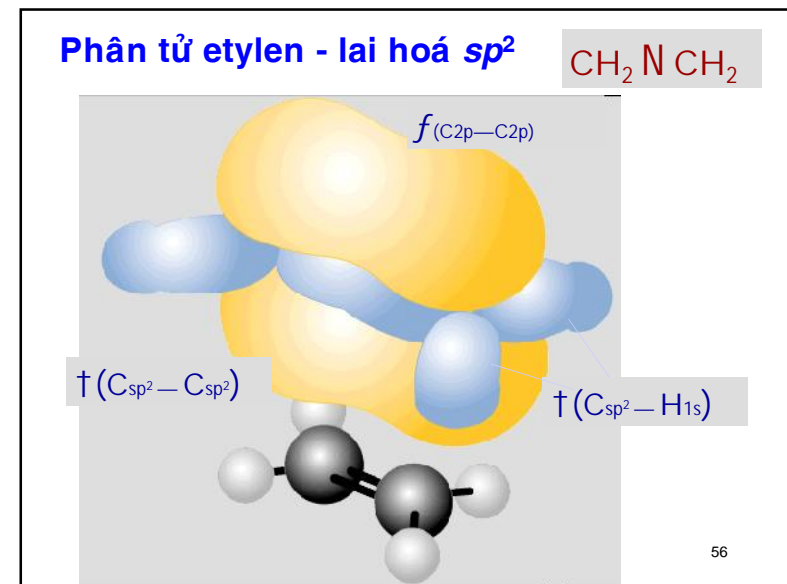
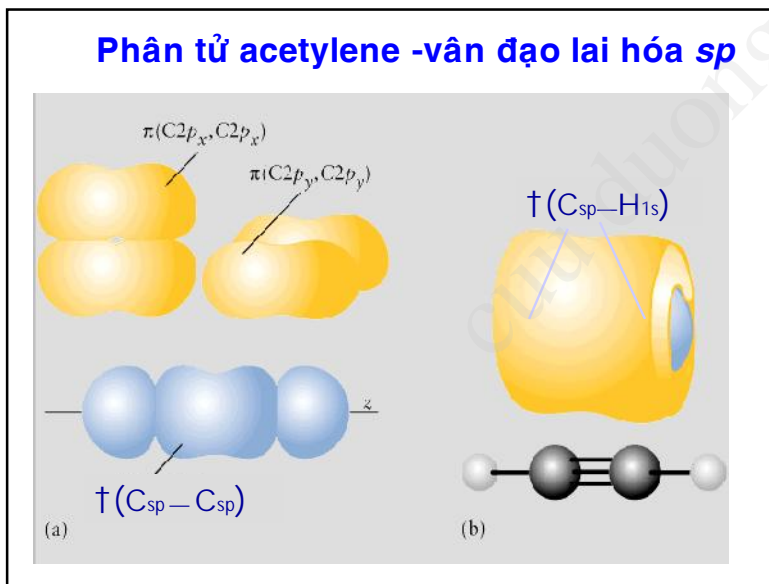
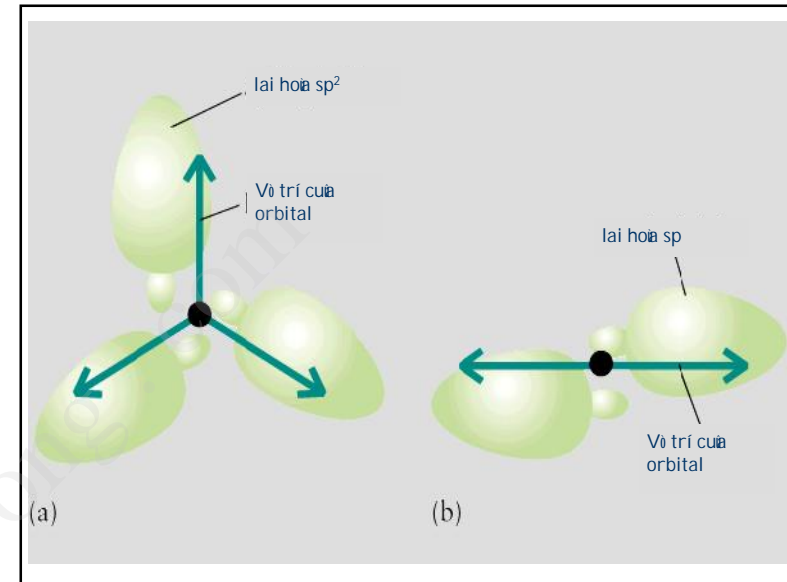
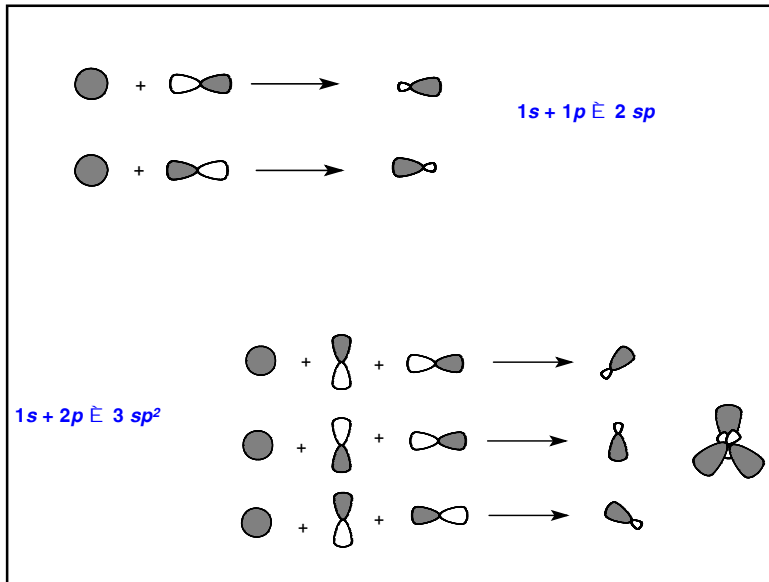
#### $sp^2$ , lai hóa tam giác:

- Tổ hợp tt của 1 AO  $s$  và 2 AO  $p$  ã 3 AO lai hóa  $sp^2$
- Trục của 3 AO lai hóa  $sp^2$  nằm trên một mặt phẳng, tạo góc  $120^\circ$  ã các AO lai hóa hướng về 3 đỉnh của tam giác đều.

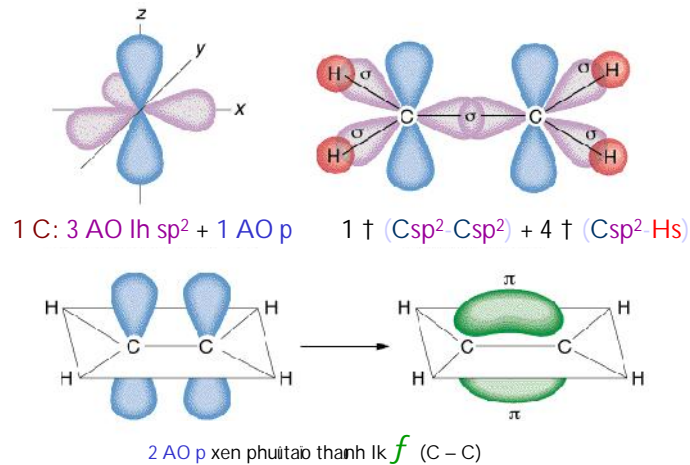
TD:  $BX_3$ ,  $AlCl_3$ ,  $CO_3^{2-}$ ,  $C_2H_4$ , ...

52

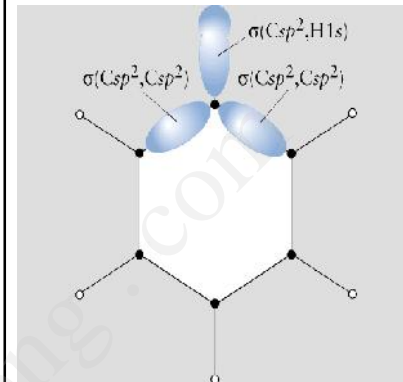




### Phân tử etylen : $\text{CH}_2 = \text{CH}_2$ cấu trúc phẳng



### Phân tử benzen -vân đạo lai hóa $sp^2$

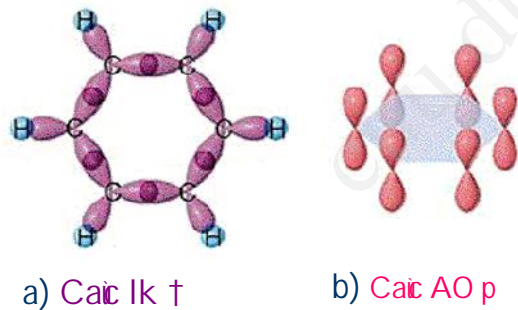


- Mỗi C dùng 1 AO 2s và 2 AO 2p tạo 3 AO lai hóa  $sp^2$ .

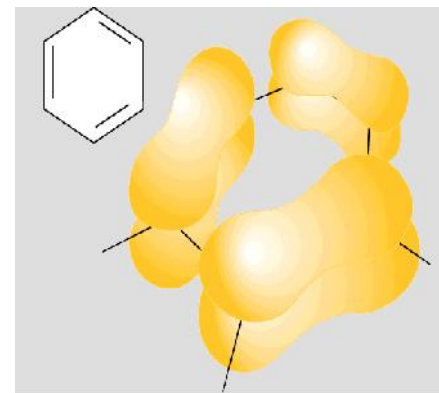
- 2 AO lai hóa  $sp^2$  xen phủ với các AO lai hóa  $sp^2$  của hai nguyên tử C bên cạnh tạo lk  $\sigma$  ( $sp^2-sp^2$ ) giữa C - C để hình thành vòng benzen.

- 1 AO lai hóa  $sp^2$  còn lại của nguyên tử C xen phủ với AO 1s của H tạo lk  $\sigma$  ( $sp^2-s$ ) giữa C - H.

### Phân tử benzen -vân đạo lai hóa $sp^2$



### Phân tử benzen -vân đạo lai hóa $sp^2$



- Mỗi nguyên tử C còn lại một AO 2p.
- AO p thuần túy này xen phủ với AO p của nguyên tử C bên cạnh tạo các liên kết  $\pi$ .

## Phân tử benzen – cấu trúc cộng hưởng

Có 2 giả thiết:

- 1) 3 lk  $f$  định cư (cục bộ) giữa các ngử C
- 2) các lk  $f$  bất định cư trên toàn vòng benzen (mỗi  $e f$  được dùng chung cho cả 6 ngử C).

Thực nghiệm:

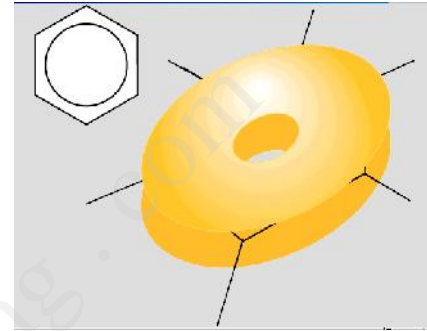
Tất cả lk C – C trong benzen có cùng độ dài.

Suy ra: các lk C – C trong benzen đều hoàn toàn như nhau  $\Rightarrow$  lk  $f$  bất định cư trong phân tử benzen.

(Chú ý: lk đơn dài hơn lk kết đôi)

61

## Phân tử benzen – cấu trúc cộng hưởng



Các liên kết  $f$  cộng hưởng

Điện tử  $f$  chuyển động trong khắp không gian vòng benzen  $\Rightarrow$  lk  $f$  không định cư

62

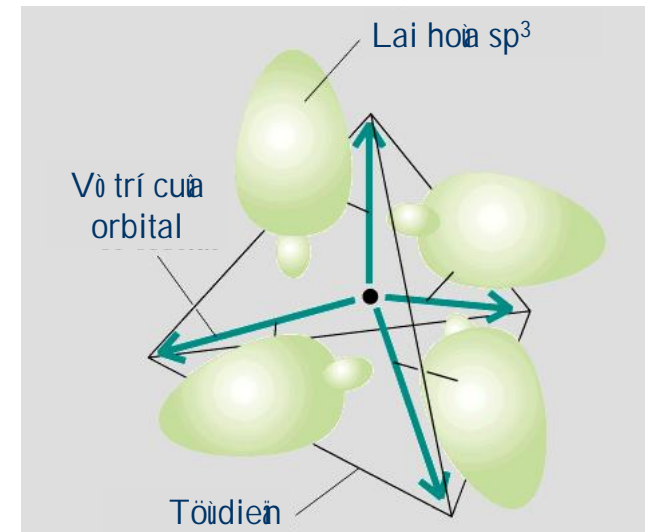
## b) Các dạng lai hóa

$sp^3$ , lai hóa tứ diện:

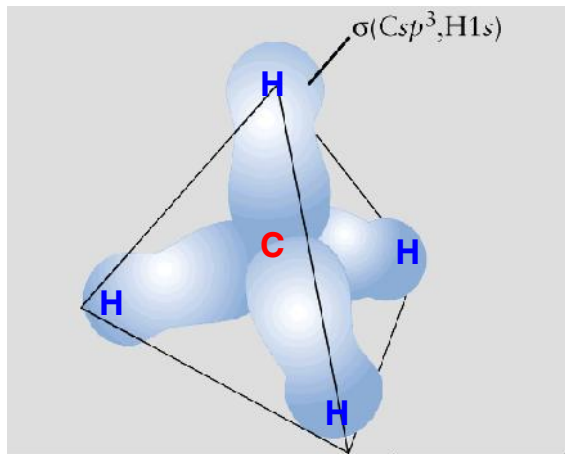
- Tổ hợp tt của 1 AO  $s$  và 3 AO  $p$   $\Rightarrow$  4 AO lai hóa  $sp^3$
- Các AO lai hóa  $sp^3$  kéo dài hướng về bốn đỉnh của tứ diện đều tạo các góc lk  $109,5^\circ$ .
- 4 AO lai hóa hoàn toàn tương đương nhau.

Td:  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{SiCl}_4$ , ...

63

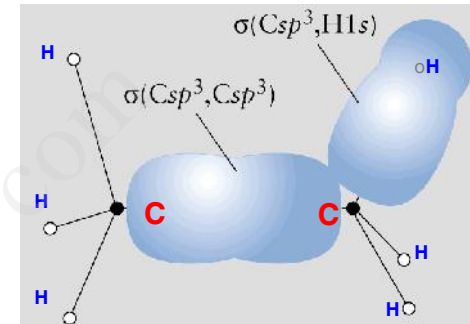


### Phân tử $\text{CH}_4$ - Vên đạo lai hóa $\text{sp}^3$



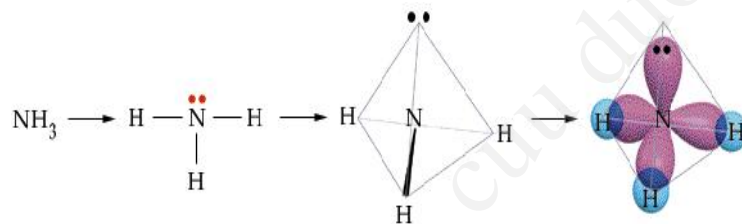
65

### Phân tử $\text{C}_2\text{H}_6$ -vên đạo lai hóa $\text{sp}^3$



66

### Vên đạo lai hoá $\text{sp}^3$ và liên kết trong phân tử $\text{NH}_3$



Do lực đẩy của đôi điện tử không liên kết nên các góc lk trong  $\text{NH}_3$  hơi bị nén :  $107,3^\circ < 109,5^\circ$  ( $\text{CH}_4$ )

67

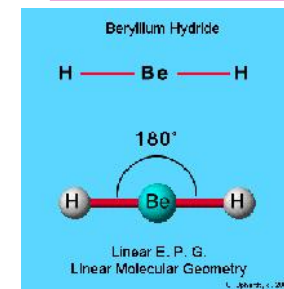
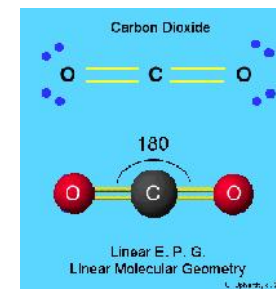
### Shapes of Molecules

We use Lewis structures to account for formula of covalent compounds. Lewis structures also account for the number of covalent bonds. Lewis structures however do **not** account for the shapes of molecules.

Molecules of  $\text{AB}_n$  have shapes dependent on the value of  $n$

$\text{AB}_2$  must be either linear or bent:

Examples of Linear molecules

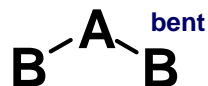


9/11/2017

Linear - No non-bonding electrons

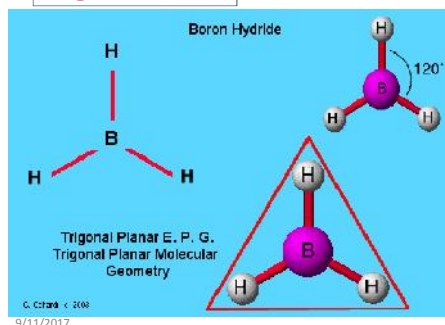
68

Linear Molecules have a bond angle =  $180^\circ$   
 Bent molecules have a bond angle  $< 180^\circ$



$AB_3$  most common shapes place the B atoms  
 at the corners of an equilateral triangle:

### Trigonal Planar



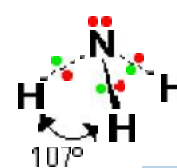
The A atom lies in  
 the *same plane* as  
 the B atoms (Flat)

Bond angle =  $120^\circ$

*No non-bonding electrons*

9/11/2017

69



### Trigonal Pyramidal

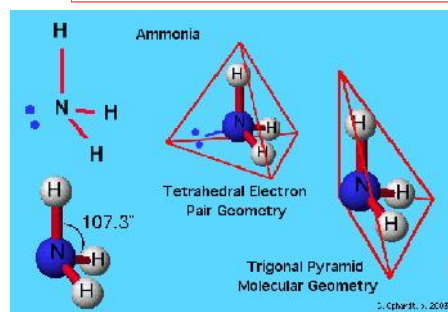
The A atom lies above the plane of the B atom.  
 Pyramid with an equilateral triangle as the base.



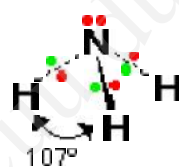
9/11/2017

70

The ideal tetrahedron has a bond angle =  $109.5^\circ$



VSEPR model explains  
 distortions of  
 molecules



The lone electron pair exerts a little extra repulsion on the three bonding  
 hydrogen atoms to create a slight compression to a  $107^\circ$  bond angle.

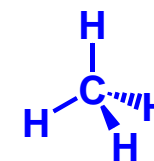
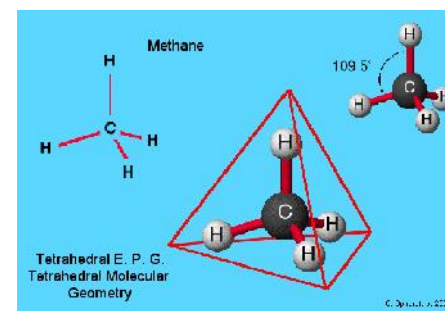
Less repulsion is exerted by a bonding pair of electrons because  
 they feel attraction from two nuclei, while a non-bonding pair feels  
 attraction from only one nucleus.

*Non-bonding pairs spread out more!*

9/11/2017

71

$AB_4$  is **Tetrahedral**



The carbon has 4 valence electrons and thus needs 4 more  
 electrons from four hydrogen atoms to complete its octet. The  
 hydrogen atoms are as far apart as possible at  $109^\circ$  bond angle.  
 This is tetrahedral geometry. The molecule is three dimensional.

9/11/2017

72