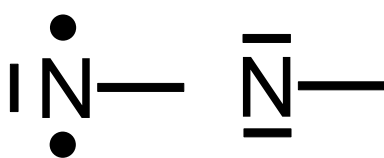
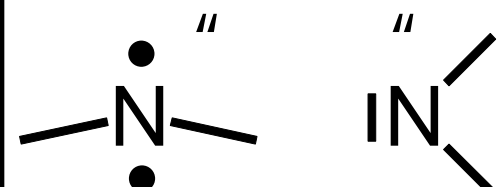
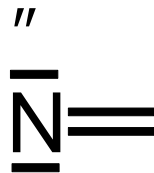
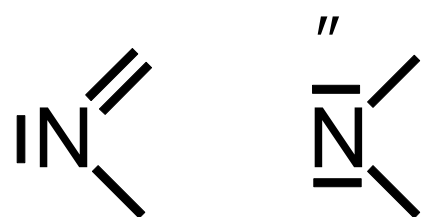
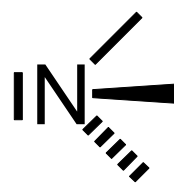

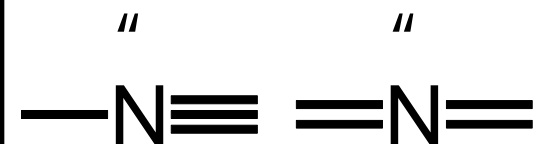
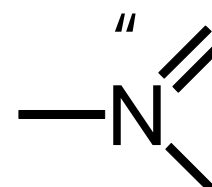
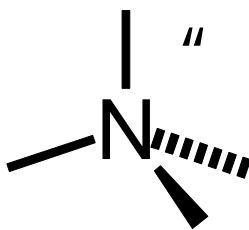

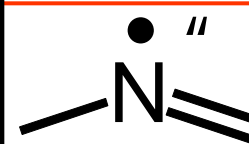
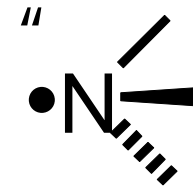


# „Normalvalente“ Verbindungen: Beispiel N

Valenz Elektronen VE	Koordinationszahl KZ		3	4
	1	2		
	<b>Triplet</b> Singulett	<b>Triplet</b> Singulett		
6				
8				
8				
7	Radikale 			

# „Hypervalente“ Verbindungen: Beispiel P

VE	KZ	1	2	3	4	5	6
		<u>Triplett</u> Singulett	<u>Singulett</u> Triplett				
6							
8							
8							
10							
10	<b>hypervalent</b>						
12							

# „Hypervalente“ Verbindungen

Stabile hypervalente  
Verbindungen

B	C	N	O	F	Ne
Al	Si	P	S	Cl	Ar
Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

keine stabile  
hypervalente  
Verbindung

Radioaktiv

# „Hypervalente“ Verbindungen

1. Moleküle werden durch Lewis Valenzstrichformeln dargestellt und jeder Bindungsstrich steht für 2 Elektronen.
2. Werden die Valenzelektronen VE nach Lewis gezählt, so verletzen hypervalente Verbindungen die Oktett-Regel durch einen Überschuss von VE-8 Elektronen.

## 3. Nomenklatur nach

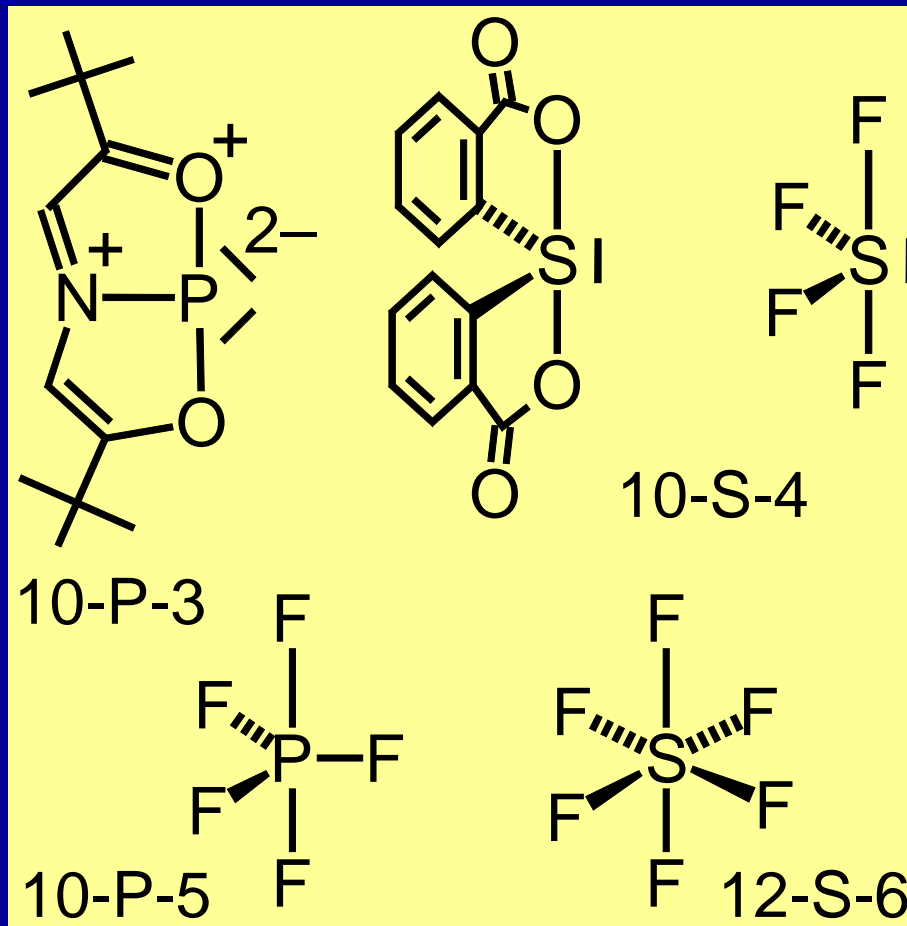
Martin & Arduengo III

Element Symbol

**VE-EI-KZ**

↑  
Valenz  
Elektronen  
zahl

↑  
Koordinations  
zahl



# **Valence Shell Electron Pair Repulsion Modell**

[moderne Version: Valence Shell Electron Pair Domain (VSEPD) Modell]

Das VSEPR-Modell erlaubt die Vorhersage der Molekülstrukturen von Verbindungen



**A = Zentralatom,**

**X = Ligandenatom,**

**E = ungebundenes (freies) Elektronenpaar,**

die

a) eine abgeschlossene Elektronenschale (closed shell) haben

und

b) dessen Zentralatom A annähernd kugelsymmetrisch ist.

# Valence Shell Electron Pair Repulsion Modell

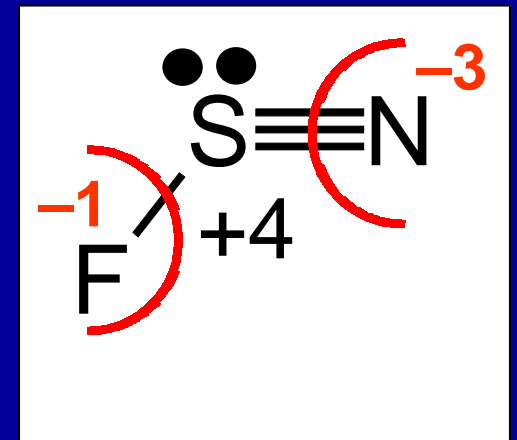
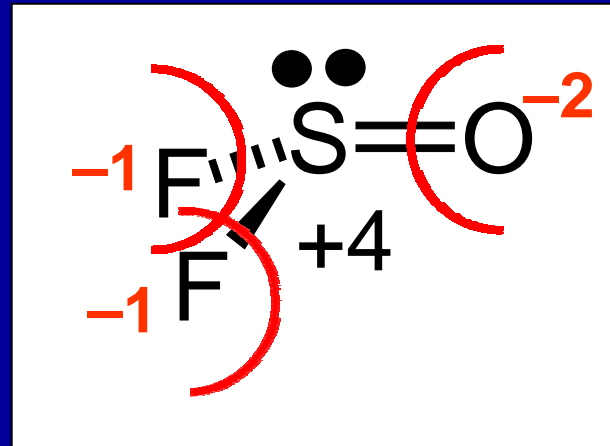
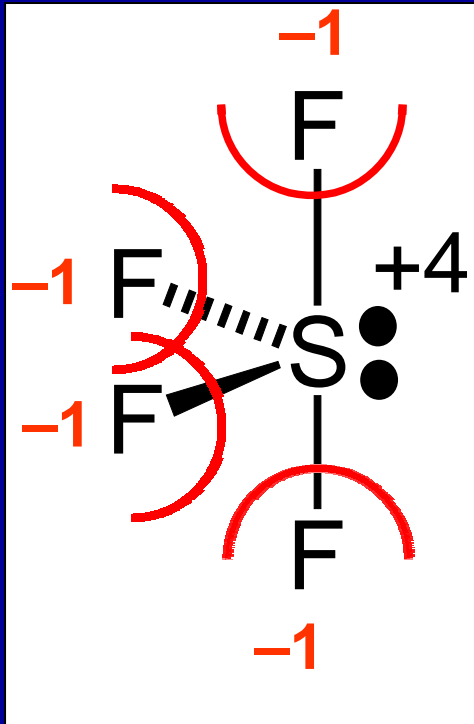
Zur Bestimmung der Anzahl  $n_E$  freier Elektronenpaare E, müssen wir die formale Oxidationszahl  $Z_{ox}$  am Zentralatom A bestimmen. In hypervalenten Verbindungen nehmen wir an, dass A der elektropositive Bindungspartner ist.

$$n_E = \frac{1}{2}(VE - Z_{ox})$$

$n_E$  = Zahl freier Elektronenpaare

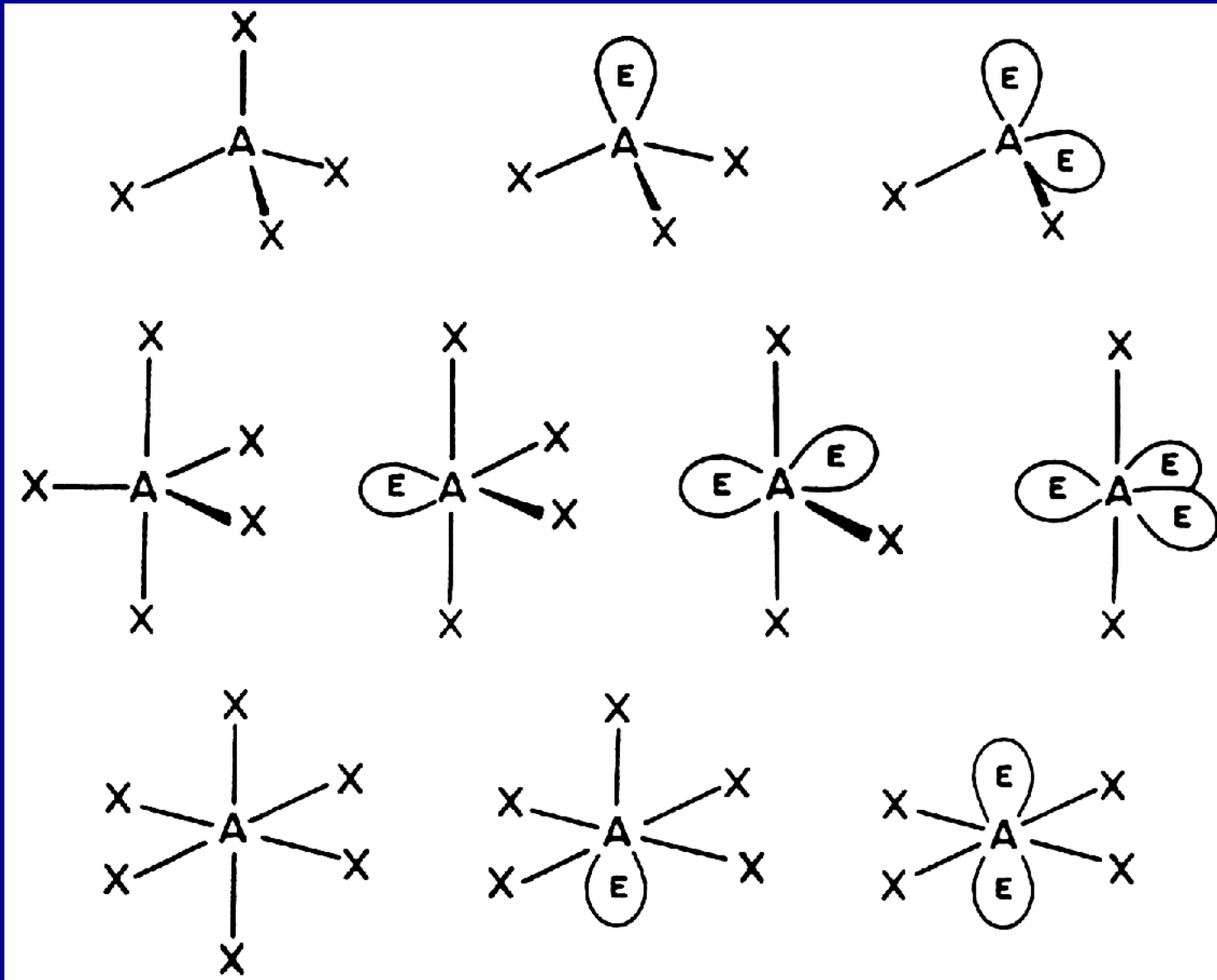
VE = Valenzelektronenzahl

$Z_{ox}$  = formale Oxidationszahl



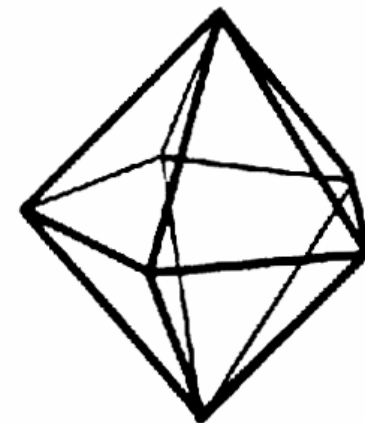
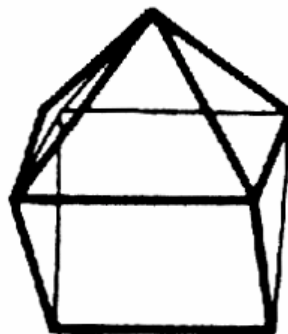
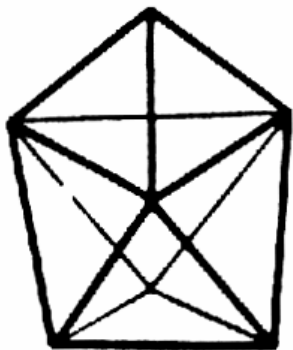
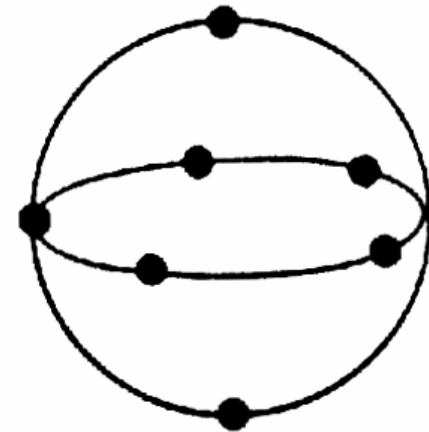
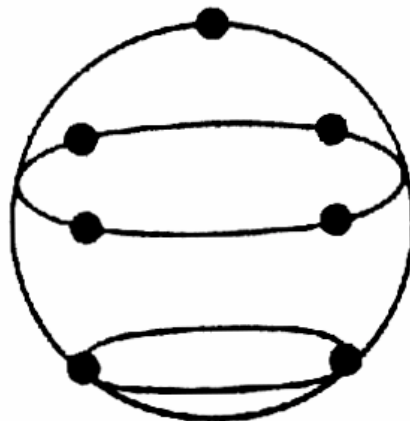
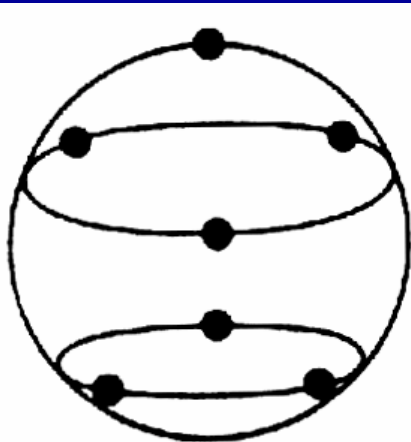
$$n_E = \frac{1}{2}(6 - 4) = 1$$

# Valence Shell Electron Pair Repulsion Modell Molekül-Formen



**A = Zentralatom; X = Ligandenatom; E = freies Elektronenpaar**

# Valence Shell Electron Pair Repulsion Modell Molekül-Formen



(a)

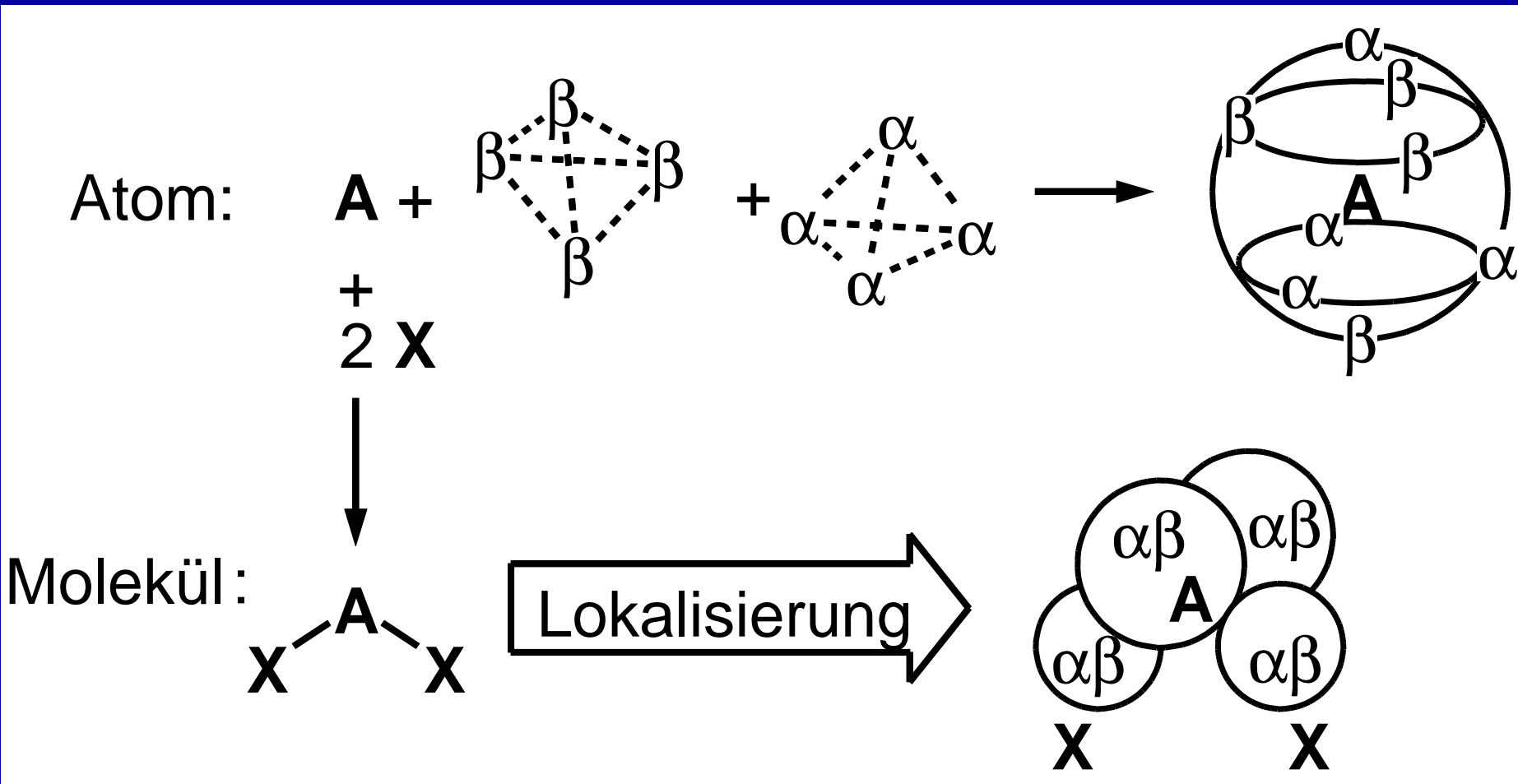
(b)

(c)

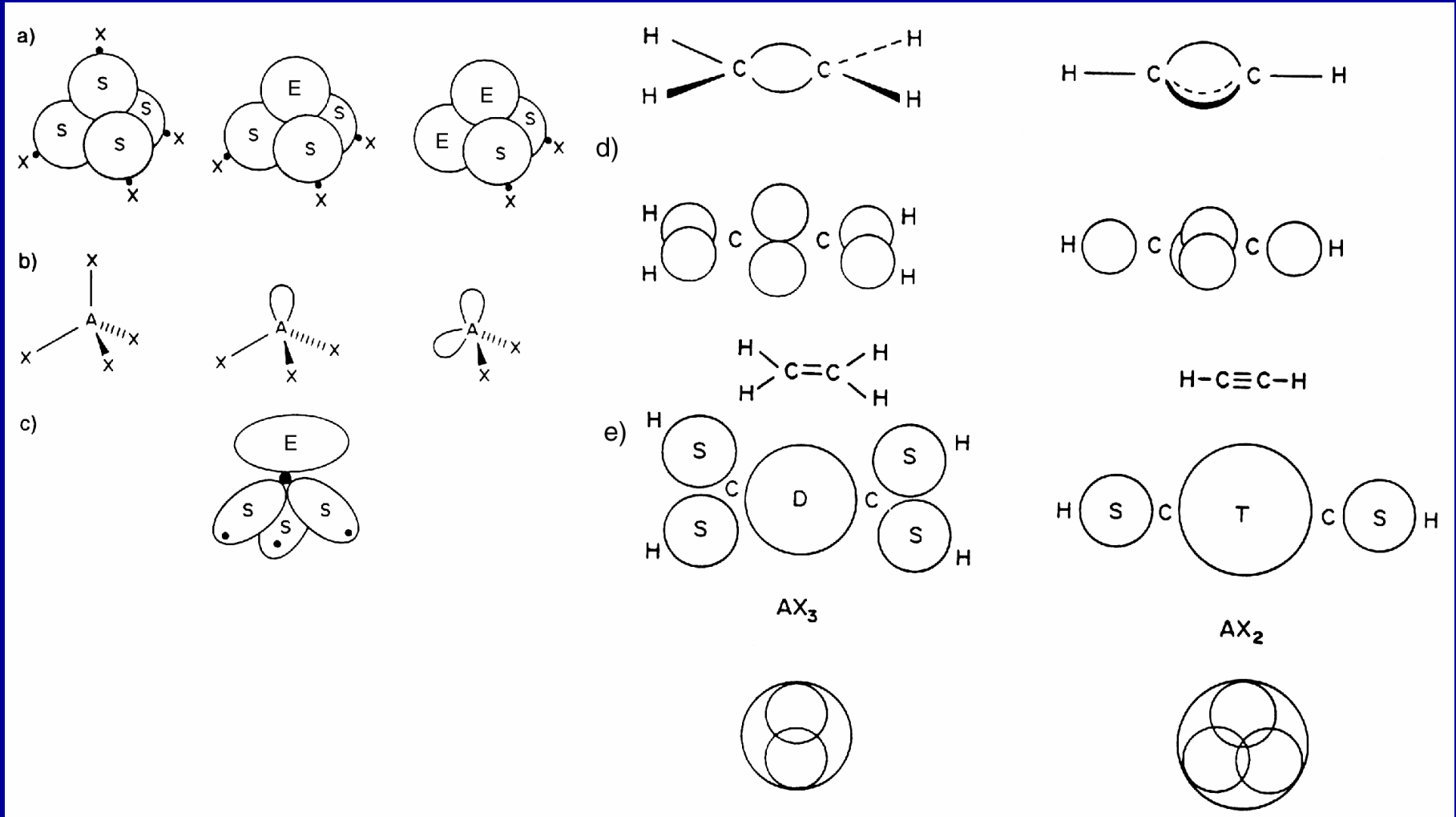
Die physikalische Basis des VSEPR-Modells ist  
das Pauli-Ausschlussprinzip:

*Die Gesamtwellenfunktion eines Systems muss  
antisymmetrisch bezüglich des Austausches  
zweier Elektronen sein.*

# Valence Shell Electron Pair Repulsion Modell



**a)  $AX_4$ ,  $AX_3E$  und  $AX_2E_2$  Moleküle im Domänenmodell (VSEPD):  
S = Einfachbindungsdomäne, E = Elektronenpaardomäne**



b) Konventionelle Strichformeln; c) Ungefähre relative Formen und Grössen der Domänen in einem  $AX_3E$ -Molekül; d) Bananenbindungsmodell von Ethylen und Acetylen und ihre Darstellung mit Bindungsdomänen; e) Grösse von Mehrfachbindungsdomänen durch Überlagerung  
 TB = Triple Bond (Dreifachbindung); DB = Double Bond (Doppelbindung);  
 EP = Electron Pair (Freies Elektronenpaar); SB = Single Bond (Einfachbindung)

Damit ergibt sich ungefähr folgende Reihenfolge der relativen Grössen von Dreifach-, Doppelbindungs-, Elektronenpaar und Einfachbindungsdomänen:

$$TB > DB \geq EP > SB$$

Damit ergibt sich z.B. folgende Reihenfolge der Abstossungen von Elektronenpaaren (EP) und Einfachbindungen (SB) mit- oder untereinander:

$$EP \leftrightarrow EP > EP \leftrightarrow SB > SB \leftrightarrow SB$$

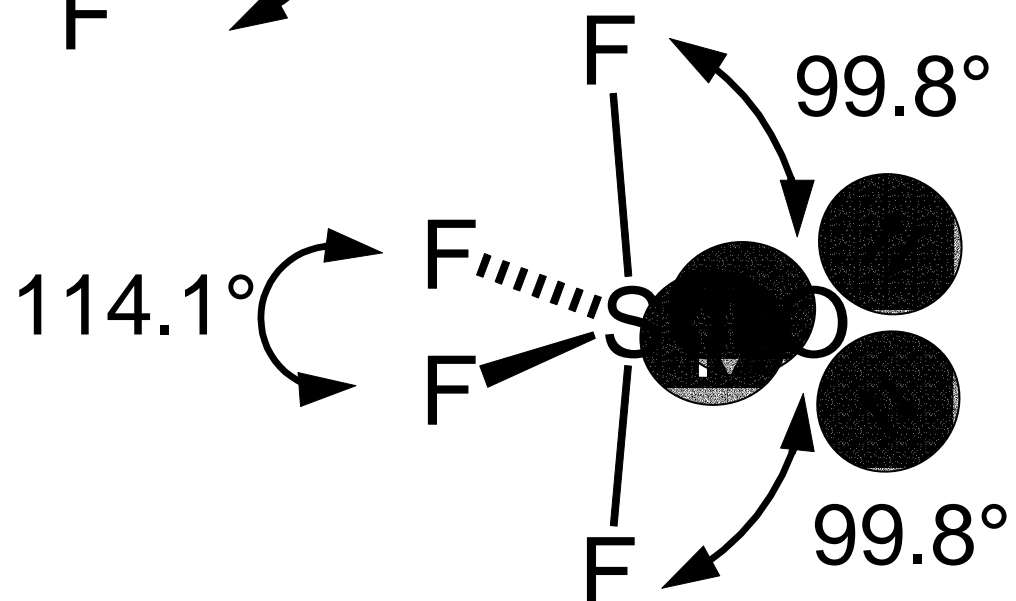
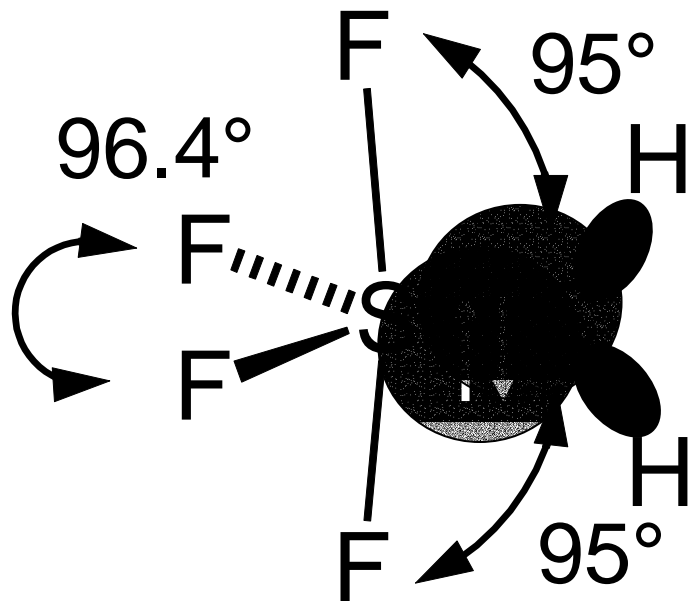
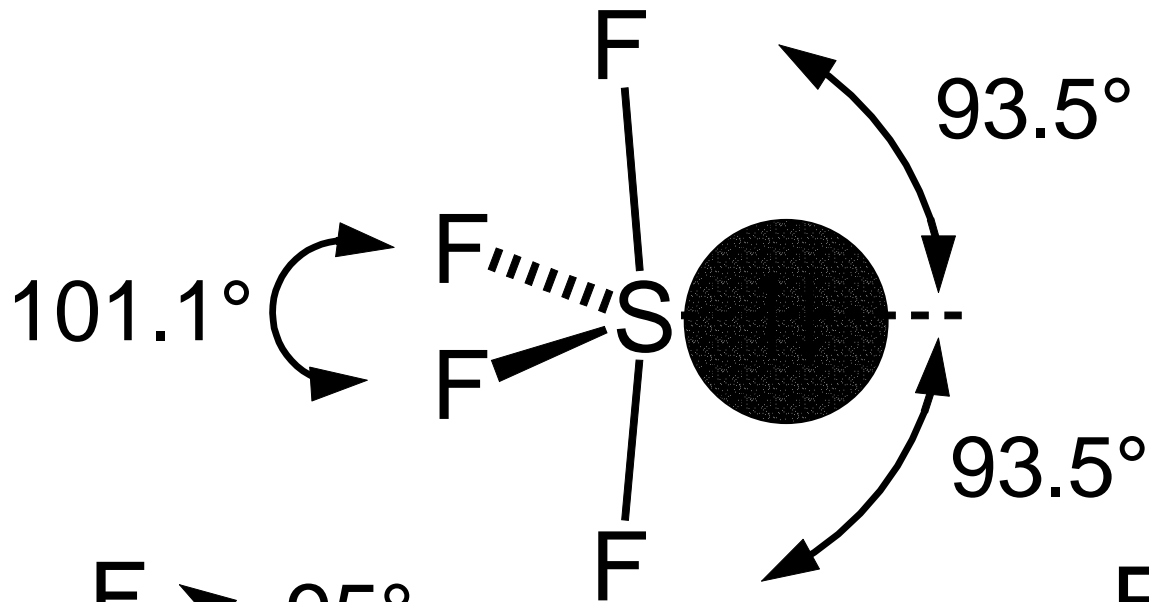
TB: Dreifachbindung (triple bond)

DB: Doppelbindung (double bond)

EP: "Freies" Elektronenpaar (electron pair)

SB: Einfachbindung (single bond)

# Valence Shell Electron Pair Repulsion Modell Strukturdetails...1



# Valence Shell Electron Pair Repulsion Modell Strukturdetails...2

