Ruimtelijke bouw of geometrie van moleculen

De **ruimtelijke bouw** of **geometrie** van een molecule is de driedimensionale schikking van de atomen in het molecule, en die geometrie speelt een belangrijke rol bij de chemische eigenschappen van het molecule. De eerder besproken lewisstructuur is een *tweedimensionale* voorstelling, toont hoe de atomen in een molecule onderling met elkaar gebonden zijn en geeft ook de vrije elektronenparen weer. De lewisstructuur zegt echter niets over de *ruimtelijke* structuur van het molecule.

De geometrie van een (eenvoudig) molecule wordt in eerste instantie bepaald door de ruimtelijke verdeling van zowel de *gebonden atomen* als de *vrije elektronenparen* rond het centrale atoom.

De som van het aantal *gebonden atomen* met het aantal *vrije elektronenparen* rond het centrale atoom noemt men het **sterisch getal** van dat atoom. Met elk gebonden atoom en met elke vrij elektronenpaar komt een orbitaal of **elektronenwolk** overeen, en het sterisch getal is dus precies gelijk aan het aantal dergelijke elektronenwolken. Let op: er wordt hierbij *geen onderscheid gemaakt* tussen atomen die enkelvoudig, dubbel of drievoudig gebonden zijn, en daarom is het sterisch getal dus *niet* (altijd) gelijk aan het aantal elektronenparen rond het centraal atoom: het sterisch getal is het aantal gebonden *atomen* plus het aantal vrije *elektronenparen*.

Om de zogenaamde **basisgeometrie van een atoom in een molecule** te bepalen kijkt men *enkel* naar deze valentie-elektronenwolken, dus zonder *onderscheid te maken tussen tussen gebonden elektronenparen en vrije elektronenparen rond dat centrale atoom*. De elektronenwolken zijn negatief geladen, ze stoten elkaar dus onderling af waardoor ze zo ver mogelijk uit elkaar gaan zitten. Dat bepaalt de ruimtelijke structuur waarin ze zich bevinden. Dit proces zal verder verklaard worden door de zogenaamde **hybridisatie** van de orbitalen van het centrale atoom met die van de omgevende atomen.

In de realiteit is er (natuurlijk) *wel* een verschil tussen vrije en gebonden elektronen rond het centrale atoom. Daarom definieert men ook de **moleculaire geometrie**, die afgeleid wordt uit de basisgeometrie door de vrije elektronenparen te negeren, en dus enkel rekening te houden met de gebonden elektronenparen.

Zoals steeds beperkt deze cursus zich tot de meest eenvoudige moleculen, waar er één centraal atoom is, en in die context gelden volgende afspraken:

Het **sterisch getal** *van een atoom in een molecule* is de som van het aantal *gebonden atomen* en het aantal *vrije elektronenparen* rond het centrale atoom, en is (dus) ook het aantal valentie-*elektronenwolken*.

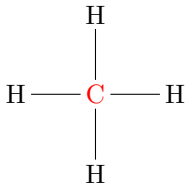
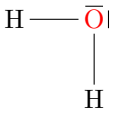
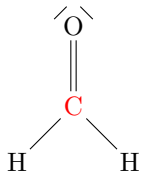
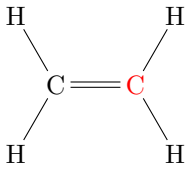
De **basisgeometrie** rond het centraal atoom is de (theoretische) ruimtelijke structuur die de elektronenwolken zouden aannemen op basis van hun elektrische afstoting.

De **moleculaire geometrie** rond het centraal atoom is de (meer realistische) ruimtelijke structuur die de atomen aannemen, waarbij de *vrije elektronenparen worden genegeerd*.

Oefening 1. Bepaal het sterische getal rondom het rode atoom in onderstaande moleculen.

CC BY-NC-SA 4.0

Ruimtelijke bouw of geometrie van moleculen

molecule	aantal gebonden atomen		aantal vrije elektronenparen		sterisch getal
	.....	+	.....	=	.....
	.....	+	.....	=	.....
	.....	+	.....	=	.....
	.....	+	.....	=	.....
	.....	+	.....	=	.....
	.....	+	.....	=	.....
	.....	+	.....	=	.....

CC BY-NC-SA 4.0
KU Leuven (2026/02/20H.33)