Voorstellingswijzen van moleculen

Een concrete verbinding of molecule kan je opschrijven met de **molecuulformule** of **brutoformule**, die elk voorkomend element bevat met ook het aantal atomen dat in de verbinding voorkomt. Zo is de molecuulformule voor water H_2O, die voor koolstofdioxide CO_2, en die voor ammoniumchloraat NH_4ClO_3.

We vermelden hier ook al kort de **chemische formule** voor chemische verbindingen, die bovendien de zogenaamde functionele groepen in de verbinding aangeeft. Voor water en koolstofdioxide is de chemische formule identiek aan de molecuulformule, maar calciumhydroxide met moleculeformule CaH_2O_2 bevat 2 hydroxidegroepen OH^-, en heeft dus als chemische formule $Ca(OH)_2$.

Terwijl de molecuulformule noch de chemische formule informatie geven over de structuur van het molecule, toont de **structuurformule** alle aanwezige atomen met hun positie in het molecule en de bindingen tussen de atomen. Die bindingen worden voorgesteld door streepjes die ook aangeven of het om enkelvoudige, dubbele of drievoudige bindingen gaat.

De **lewisstructuur** (ook **lewisformule** genoemd) geeft naast de bindingen in een molecule ook de *verdeling van alle buitenste elektronen* over de atomen weer door puntjes of streepjes rond de atomen. Concreet staan rond elk atoom de valentie-elektronen: de bindende elektronenparen als een streepje tussen de twee atomen, en de overblijvende niet-bindende vrije elektronenparen als twee puntjes of één streepje zijdelings van het atoom. We tonen verder hoe je de lewisstructuur van een molecule opstelt.

Samengevat:

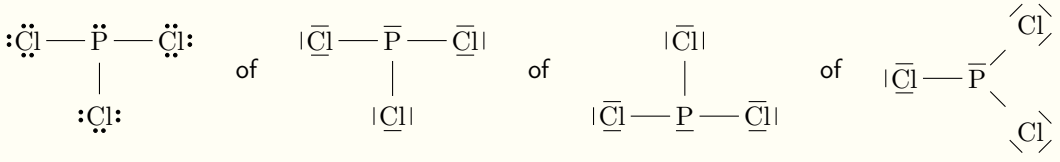
molecuulformule:	symbolen van de voorkomende elementen met aantal atomen
chemische formule:	molecuulformule maar gegroepeerd met chemische functies
structuurformule:	2D tekening van de atomen met hun bindingen in het molecule
lewisstructuur:	structuurformule uitgebreid met vrije elektronenparen

Voorbeeld 1. Verschillende voorstellingswijzen van water en koolstofdioxide.

Naam	molecuulformule	structuurformule	lewisstructuur
water	H_2O	$H-O-H$	$H-\overline{O}-H$
koolstofdioxide	CO_2	$O=C=O$	$\langle O=C=O \rangle$

Opmerking 1.

- In de lewisstructuur stellen zowel de streepjes rond de atomen als tussen de atomen telkens één elektronenpaar voor.
- In H_2O is 2 de **index**, die het aantal H-atomen geeft in één molecule. De index één wordt niet geschreven, dus O staat voor O_1.
- De precieze vorm van de lewisstructuur is niet belangrijk:



CC BY-NC-SA 4.0
KU Leuven (2026/02/20H.36)