

Jonbindning

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #molekylfysik #fenomen

Kurs: F0005T Förkunskaper: Elektronkonfiguration

En atom lämnar över en eller två valenselektroner till en annan, så att båda får fulla skal och blir joner med motsatt laddning – natrium ger sin 3s-elektron till klor och bildar Na^+ och Cl^- . De motsatta laddningarna attraherar varandra och bygger saltkristaller. Bindningen är stark men bryts till exempel av vattenlösning. Samma sak gäller molekylära joner som NH_4^+ och SO_4^{2-} .

Formeln, symbol för symbol

$$\underbrace{E_B}_{\text{bindnings-energi}} = \underbrace{|U(r_0)|}_{\text{dra isär jonerna}} - \underbrace{(E_{\text{jon}} - E_{\text{aff}})}_{\text{ges tillbaka när jonerna blir atomer}}$$
$$U(r_0) = \underbrace{-\frac{ke^2}{r_0}}_{\text{punkt-laddningar}} \underbrace{\left(1 - \frac{1}{n}\right)}_{\text{repulsionen tar andelen } 1/n}$$

Jonerna tjänar $|U(r_0)|$ på att dras ihop, men de har först kostat $E_{\text{jon}} - E_{\text{aff}}$ att skapa. För NaCl blir det $5,7 - 1,5 \approx 4,2$ eV.

1. Energibalansen när jonerna bildas

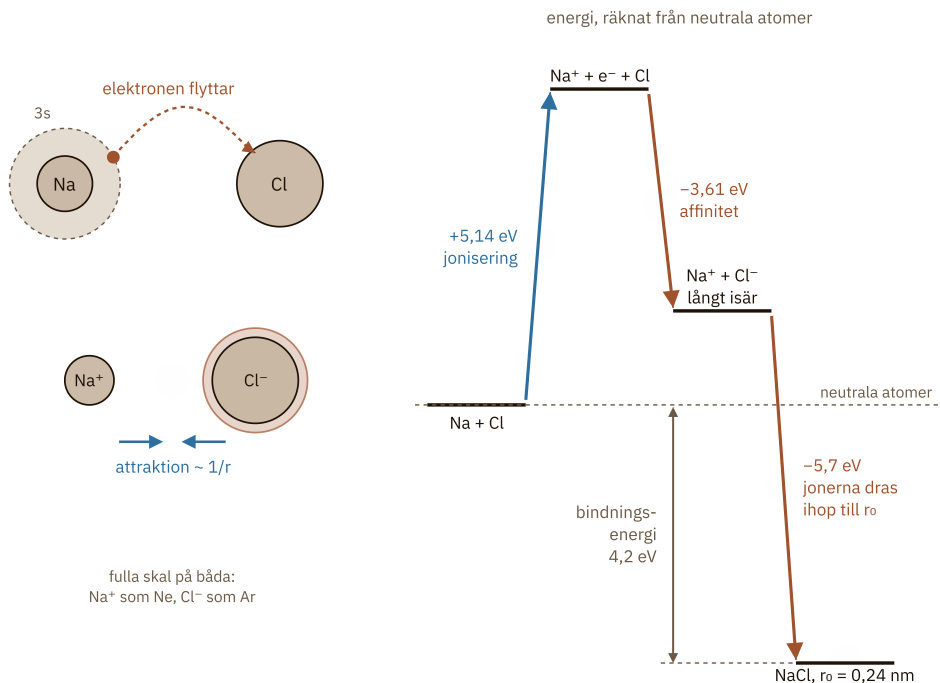
Att flytta en elektron från natrium till klor kostar energi innan jonerna ens har närmats sig varandra. Två storheter avgör kostnaden:

- **Joniseringsenergin** E_{jon} är energin som krävs för att ta bort elektronen från den neutrala atomen. För Na är den 5,138 eV.
- **Elektronaffiniteten** E_{aff} är energin som frigörs när en neutral atom tar upp en extra elektron. För Cl är den 3,613 eV, eftersom 3p-skalet då blir fullt och den extra elektronen känner en stor del av kärnladdningen.

Att bilda två joner långt från varandra kostar alltså nettot

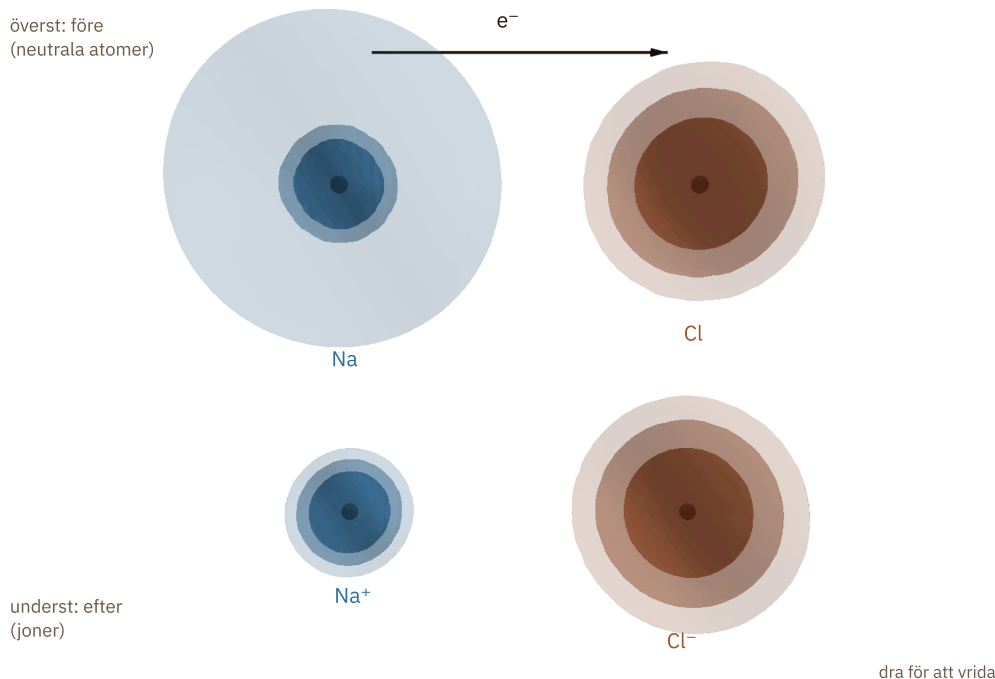
$$\Delta E = E_{\text{jon}} - E_{\text{aff}} = 5,138 \text{ eV} - 3,613 \text{ eV} = 1,525 \text{ eV}$$

Jonerna är alltså *inte* lägre i energi än de neutrala atomerna så länge de är åtskilda. Det är först den elektriska attraktionen mellan dem som gör bindningen lönsam.



Energibokföringen för NaCl, räknat från två neutrala atomer. Att flytta elektronen kostar netto $5,14 - 3,61 = 1,53 \text{ eV}$, och först när jonerna dras ihop till r_0 ($-5,7 \text{ eV}$) hamnar molekylens energi $4,2 \text{ eV}$ under atomerna.

Överföringen syns också i elektronmolnen. Natriums ensamma 3s-elektron är svagt bunden och sprider ut sig långt från kärnan. När den är borta återstår ett kompakt Na^+ med bara fyllda inre skal. Klor tar emot elektronen i 3p-skalet, och Cl^- blir något större än den neutrala atomen.



Na och Cl före (överst) och efter (underst) elektronöverföringen, i 3D (vrid med musen). Na krymper kraftigt när den yttre 3s-elektronen försvinner, och Cl⁻ sväller lite. Isoytorna ligger vid samma täthet för alla fyra, 0,05, 0,005 och 0,0005 elektroner per a_0^3 , och hovringen visar radien. Kvalitativ modell med Slater-orbitaler.

Jonbindningar kan också omfatta två elektroner per atom. Jordalkalimetaller som magnesium lämnar ifrån sig två elektroner och bildar till exempel Mg²⁺(Cl⁻)₂. Överföring av fler än två elektroner är ovanlig, och då tar **kovalent bindning** över.

2. Potentialkurvan $U(r)$

När jonerna närmar sig varandra sjunker den elektriska potentiella energin som för två punktladdningar, $-ke^2/r$ med $ke^2 = 1,44 \text{ eV}\cdot\text{nm}$. På kort avstånd överlappar elektronmolnen, och **Paulis uteslutningsprincip** tvingar elektronerna till högre tillstånd. Det ger en repulsion som växer mycket snabbt. En enkel modell är

$$U(r) = -\frac{ke^2}{r} + \frac{B}{r^n}$$

där B och exponenten n anpassas till mätdata. Summan har ett minimum vid jämviktsavståndet r_0 : för $r > r_0$ drar jonerna i varandra, för $r < r_0$ stöter de bort varandra.

Härledning av energin i minimum

Villkoret för minimum.

$$\frac{dU}{dr} = \frac{ke^2}{r^2} - \frac{nB}{r^{n+1}} = 0 \quad \text{vid } r = r_0$$

$$B = \frac{ke^2 r_0^{n-1}}{n}$$

Sätt tillbaka i U .

$$U(r_0) = -\frac{ke^2}{r_0} + \frac{ke^2 r_0^{n-1}}{n r_0^n} = -\frac{ke^2}{r_0} + \frac{ke^2}{n r_0}$$

$$U(r_0) = -\frac{ke^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

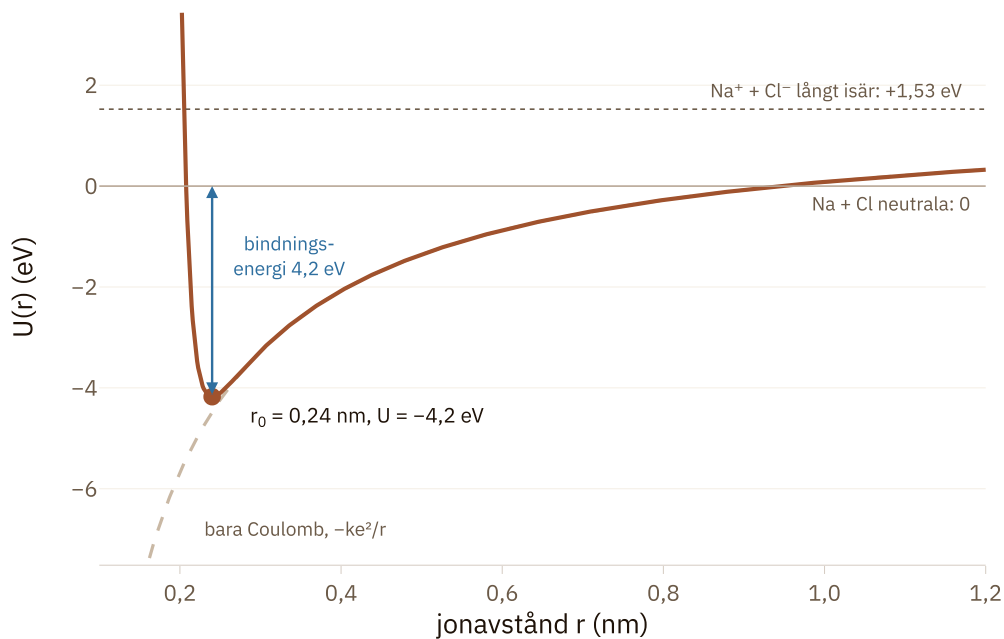
Repulsionen minskar alltså bindningen med andelen $1/n$ av punktladdningsvärdet.

$$U(r_0) = -\frac{ke^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

Bindningsenergin är energin som krävs för att dela molekylen i två **neutrala** atomer. Jonerna ska först dras isär, vilket kostar $|U(r_0)|$, och sedan få tillbaka elektronen, vilket ger tillbaka $E_{\text{jon}} - E_{\text{aff}}$:

$$E_B = |U(r_0)| - (E_{\text{jon}} - E_{\text{aff}})$$

NaCl. Som punktladdningar på avståndet 0,24 nm är $ke^2/r_0 = 1,44/0,24 = 6,0$ eV. Det uppmätta minimivärdet är -5,7 eV, något grundare eftersom molnen redan överlappar. Bindningsenergin blir $5,7 - 1,525 \approx 4,2$ eV.



$U(r)$ för Na^+ och Cl^- , räknat från två neutrala atomer. Långt isär ligger jonerna 1,53 eV över de neutrala atomerna. Den streckade kurvan är ren Coulombattraktion. Den heldragna är modellkurvan med repulsion, anpassad så att minimum hamnar vid 0,24 nm och $-5,7$ eV elektrisk potentiell energi, alltså $-4,2$ eV relativt de neutrala atomerna.

⚠ Vanliga fel

- **Bindningsenergin räknas mot joner i stället för mot atomer.** $|U(r_0)|$ är energin för att separera jonerna. Bindningsenergin för molekylen gäller neutrala atomer, så $E_{\text{jon}} - E_{\text{aff}}$ ska dras av.
- **Fel tecken på elektronaffiniteten.** Affiniteten är energi som frigörs. Nettokostnaden för jonerna är $E_{\text{jon}} - E_{\text{aff}}$, inte summan.
- **Punktladdningsvärdet tas som exakt.** ke^2/r_0 överskattar bindningen, eftersom repulsionen från överlappande elektronmoln saknas. Faktorn $1 - 1/n$ korregerar för det.
- **Enheterna i ke^2/r .** Med $ke^2 = 1,44$ eV·nm och r i nm blir svaret direkt i eV. Med SI-enheter blir det joule och måste räknas om.

3. Lösta exempel

☰ Exempel – Kaliumbromid

Joniseringsenergin för kalium är 4,34 eV och elektronaffiniteten för brom är 3,36 eV.

Jämviktsavståndet i en KBr-molekyl är 0,282 nm. a) Vilken energi krävs för att bilda åtskilda joner K^+ och Br^- ur neutrala atomer? b) Vilken är den elektriska potentiella energin vid r_0 om jonerna

behandlas som punktladdningar? c) Uppskatta bindningsenergin med punktladdningsmodellen.
d) Upprepa c) med repulsionen B/r^9 , alltså $n = 9$.

Lösning

a)

$$E_{\text{jon}} - E_{\text{aff}} = 4,34 \text{ eV} - 3,36 \text{ eV} = \boxed{0,98 \text{ eV}}$$

b)

$$U = -\frac{ke^2}{r_0} = -\frac{1,44 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{0,282 \text{ nm}} = \boxed{-5,11 \text{ eV}}$$

c)

$$E_B = 5,11 \text{ eV} - 0,98 \text{ eV} = \boxed{4,13 \text{ eV}}$$

d) Med $n = 9$ minskar $|U(r_0)|$ med andelen $1/9$:

$$|U(r_0)| = 5,11 \cdot \frac{8}{9} \text{ eV} = 4,54 \text{ eV}$$

$$E_B = 4,54 \text{ eV} - 0,98 \text{ eV} = \boxed{3,56 \text{ eV}}$$

Repulsionen sänker uppskattningen med ungefär 0,6 eV, alltså runt 14 %.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Se jämförelsen i 6. Bindningstyperna jämförda.

Läsning

- 42.1 Types of Molecular Bonds