

Vätebindning

19 okt. 2026, 8 min läsning

UTKAST

#fysik #molekylfysik #fenomen

Kurs: F0005T Förkunskaper: Dipolmoment, Van der Waals-bindning

En väteatom som är kovalent bunden till kväve, syre eller fluor har fått sin elektron så förskjuten att den nästan är en naken proton. Den lilla positiva änden kan komma mycket nära ett fritt elektronpar på en annan sådan atom och binda de två molekylerna till varandra. Det är vätebindningen. Med 0,1–0,4 eV är den starkare än van der Waals-bindningen men mycket svagare än en kovalent bindning, och den är riktad. Den ger vatten dess höga kokpunkt, gör is lättare än vatten och håller ihop de två strängarna i DNA.

Formeln, symbol för symbol

$$U = \underbrace{-\frac{k\delta^2}{r_{\text{HO}}}}_{\text{H}^{\delta+} \text{ dras mot grannens O}^{\delta-}} + \underbrace{\frac{k\delta^2}{r_{\text{OO}}}}_{\text{de två O}^{\delta-} \text{ stöter bort varandra}}$$

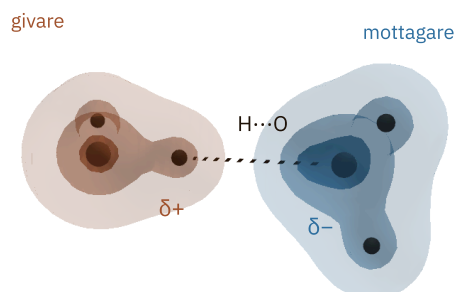
Partialladdningarna $\pm\delta$ sitter på atomerna som punktladdningar. Vätet ligger mellan de två syreatomerna, så attraktionen över det korta avståndet r_{HO} vinner över repulsionen över det längre r_{OO} .

1. Mekanismen: en nästan naken proton

En vätebindning skrivs $\text{X}-\text{H}\cdots\text{Y}$. Väteatomen sitter kovalent bunden till atomen X, **givaren**, och dras mot ett fritt elektronpar på atomen Y, **mottagaren**. Både X och Y är kväve, syre eller fluor.

- **Varför just N, O och F.** De drar starkt i elektronparet i bindningen till väte, så bindningen blir kraftigt polär, se **Dipolmoment**. De har också fria elektronpar som kan ta emot en vätebindning.
- **Varför bara väte.** Väte har bara en elektron. När den dras bort blir det kvar en ensam proton utan något inre elektronmoln, mycket mindre än någon annan positiv jon. Den kan därför komma riktigt nära mottagarens elektronpar.

Vätebindningen är alltså en extra stark variant av dipol–dipolbindningen i **Van der Waals-bindning**. Den kovalenta O–H-bindningen finns **inom** molekylen, vätebindningen **mellan** molekylerna.



dra för att vrida

Två vattenmolekyler i 3D (vrid med musen). Ett väte i givaren pekar rakt mot ett fritt elektronpar på mottagarens syre, och den prickade linjen är vätebindningen $H\cdots O$, ungefär 0,19 nm. Givarens väte i bryggan har tunnare moln än det andra: elektronen är förskjuten mot syret. Båda molekylerna har vinkeln $104,5^\circ$ mellan sina O–H-bindningar. Kvalitativ modell (summor av atomtätheter), isoytor vid 50, 20 och 5 % av maxtätheten.

2. Energi och riktning

Energin. En enkel modell placerar partialladdningar på atomerna och räknar med Coulombenergin mellan dem. I den linjära bryggan $O-H\cdots O$ har givarens väte $+\delta$ och båda syreatomerna $-\delta$. Givarens eget syre bidrar inte till energin mot vätet, eftersom de sitter i samma molekyl. Kvar blir attraktionen $H\cdots O$ och repulsionen $O\cdots O$:

$$U = k \delta^2 \left(\frac{1}{r_{OO}} - \frac{1}{r_{HO}} \right)$$

Fysika: Fe1 (Coulombs lag, k)

För vatten ger modellen ungefär $-0,28$ eV, se exemplet nedan. Uppmätta vätebindningar ligger i intervallet

$$E_{\text{vätebindning}} \approx 0,1\text{--}0,4 \text{ eV}$$

alltså mellan van der Waals-bindningen, som är 0,1 eV eller mindre, och den kovalenta bindningen på 1–5 eV. Se jämförelsen i **6. Bindningstyperna jämförda**.

Vid rumstemperatur är $k_B T = 0,026$ eV, alltså några gånger till drygt tio gånger mindre än en vätebindning. Enskilda vätebindningar i flytande vatten bryts och bildas därför hela tiden, men många tillsammans håller.

Riktningen. Bindningen är starkast när X, H och Y ligger på en rad. Då ligger vätet mitt i bryggan och attraktionen $H \cdots Y$ vinner mest över repulsionen $X \cdots Y$. Mottagarens fria elektronpar har dessutom bestämda riktningar, ungefär mot hörnen i en tetraeder som i **metan**. Vätebindningen är därför riktad, till skillnad från van der Waals-bindningen, och det är riktningen som bestämmer strukturen i is och DNA.

3. Vatten och is

En vattenmolekyl har två väten som kan ge vätebindningar och två fria elektronpar på syret som kan ta emot dem. Varje molekyl kan alltså delta i fyra vätebindningar, riktade ungefär mot hörnen i en tetraeder.

I **is** har varje molekyl precis fyra vätebindningar. Tetraedrarna fogas ihop till ett nätverk av sexkantiga ringar, den **hexagonala** isstrukturen, med mycket tomrum mellan molekylerna. När isen smälter bryts en del av bindningarna, nätverket faller delvis ihop, och molekylerna kommer närmare varandra. Därför är is lättare än vatten:

$$\rho_{\text{is}} = 916,2 \text{ kg/m}^3 \quad \rho_{\text{vatten}} = 999,8 \text{ kg/m}^3 \quad (0^\circ \text{C})$$

Fysika: T h1

Vatten utvidgar sig alltså med $999,8/916,2 - 1 \approx 9\%$ när det fryser. Över smältpunkten fortsätter nätverket att falla ihop, och densiteten ökar till maximum vid 4°C . Först därefter tar den vanliga värmeutvidgningen över. Det är **densitetsanomalin**: isen flyter, och sjöar fryser uppifrån.

4. Kokpunktsanomalin

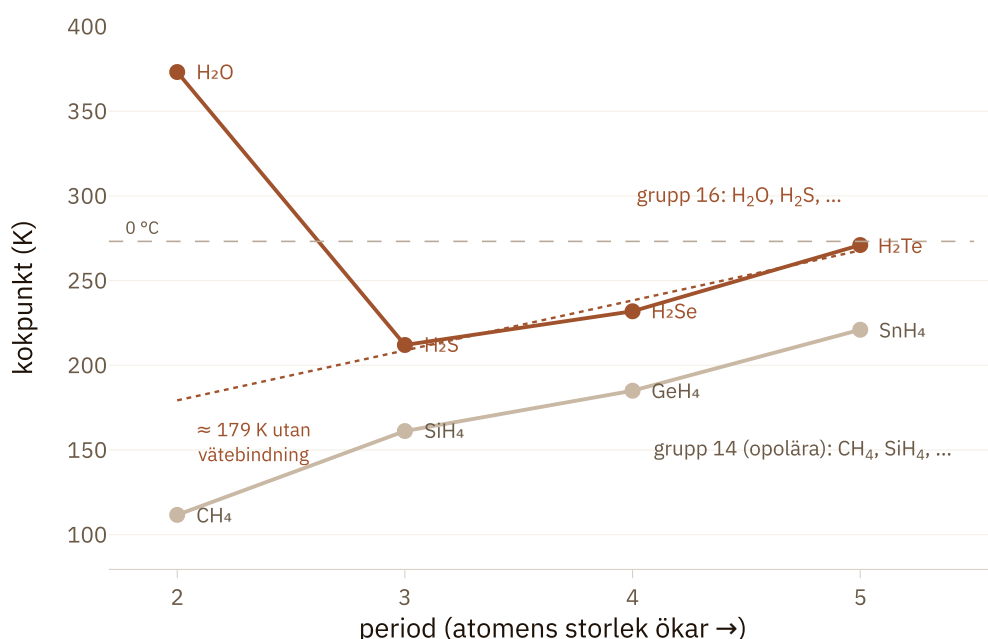
Vattnet och dess tyngre släktingar i grupp 16 har samma form, $H-X-H$, men olika stora centralatomer. Normalt stiger kokpunkten med molekylens storlek, eftersom större elektronmoln är lättare att polarisera och ger starkare Londondispersion, se **Van der Waals-bindning**.

ämne	period	kokpunkt
H ₂ O	2	373 K
H ₂ S	3	212 K
H ₂ Se	4	232 K

ämne	period	kokpunkt
H ₂ Te	5	271 K

Fysika: T g3 (H₂O, H₂S)

Från H₂S till H₂Te följer kokpunkten trenden. Förlängs trenden till H₂O hamnar kokpunkten kring 180 K, alltså nästan 200 K under den verkliga. Skillnaden är vätebindningarna: syre är tillräckligt elektronegativt för att bilda dem, svavel, selen och tellur är det inte. I grupp 14, där ingen av molekylerna bildar vätebindningar, stiger kokpunkten jämnt hela vägen från CH₄.



Kokpunkten för väteföreningarna i grupp 16 och, som jämförelse, grupp 14. Den prickade linjen är en rät linje anpassad till H₂S–H₂Te (minsta kvadratmetoden) och förlängd till period 2. Utan vätebindningar skulle vatten koka kring 180 K. Värdena för H₂O och H₂S är från Fysika, övriga är typiska tabellvärden.

5. DNA-basparen

DNA består av två strängar som hålls ihop av vätebindningar mellan baserna. Baserna passar ihop parvis, och antalet vätebindningar är bestämt av hur givare och mottagare sitter i molekylerna:

- **A–T**, adenin och tymin, binds med **två** vätebindningar.
- **G–C**, guanin och cytosin, binds med **tre** vätebindningar.

Varje enskild bindning är svag och kan brytas av värmerörelse, men en DNA-molekyl har tusentals baspar i rad, och tillsammans håller de ihop dubbelspiralen. Att bindningarna är svaga är samtidigt en förutsättning: strängarna måste kunna öppnas som ett blixtlås när DNA kopieras eller läses av, utan att

de kovalenta bindningarna inom strängarna bryts. Ett avsnitt med många G–C-par har fler vätebindningar och kräver högre temperatur för att separera.

⚠ Vanliga fel

- **Vätebindningen tas för O–H-bindningen.** O–H inom molekylen är en kovalent bindning på flera eV. Vätebindningen är den svaga bindningen $\text{H}\cdots\text{O}$ mellan två molekyler.
- **Allt väte tros bilda vätebindningar.** Vätet måste sitta på N, O eller F. Väte på kol, som i metan, ger ingen vätebindning, och därför följer CH_4 den vanliga kokpunktstrenden.
- **Repulsionen glöms i punktladdningsmodellen.** Mottagarens syre stöter bort givarens syre. Utan termen $k\delta^2/r_{\text{OO}}$ blir energin ungefär tre gånger för stor.
- **Fel avstånd.** r_{HO} i bryggan är avståndet $\text{O}\cdots\text{O}$ minus O–H-bindningens längd, inte $\text{O}\cdots\text{O}$.
- **Tätheten i is tros vara större.** Det öppna hexagonala nätverket gör att is har *lägre* densitet än vatten, 916 mot 1000 kg/m³.
- **A–T och G–C blandas ihop.** A–T har två vätebindningar, G–C tre.

6. Lösta exempel

≡ Exempel – Vätebindningen i en vattendimer

I en vattendimer pekar en O–H-bindning i den ena molekylen rakt mot syret i den andra. Avståndet $\text{O}\cdots\text{O}$ är 0,285 nm och O–H-bindningen är 0,0958 nm. Varje O–H-bindning har dipolmomentet 1,51 D. a) Bestäm partialladdningen δ på väte, i enheter av e . b) Uppskatta bindningsenergin med punktladdningsmodellen $U = k\delta^2 (1/r_{\text{OO}} - 1/r_{\text{HO}})$. c) Jämför med $k_B T$ vid 300 K.

✎ Lösning

a) Dipolmomentet är $p = \delta d$ med d som bindningslängden, se **Dipolmoment**:

$$\delta = \frac{p}{d} = \frac{1,51 \cdot 3,336 \cdot 10^{-30}}{0,0958 \cdot 10^{-9}} \text{ C} = 5,26 \cdot 10^{-20} \text{ C}$$

$$\frac{\delta}{e} = \frac{5,26 \cdot 10^{-20}}{1,602 \cdot 10^{-19}} = \boxed{0,328}$$

Fysika: Te

b) Vätet ligger på linjen mellan syreatomerna:

$$r_{\text{HO}} = 0,285 \text{ nm} - 0,0958 \text{ nm} = 0,189 \text{ nm}$$

Med $ke^2 = 1,44 \text{ eV} \cdot \text{nm}$ blir

$$\begin{aligned} U &= 1,44 \cdot 0,328^2 \left(\frac{1}{0,285} - \frac{1}{0,189} \right) \text{ eV} \\ &= 0,155 \cdot (-1,78) \text{ eV} \approx \boxed{-0,28 \text{ eV}} \end{aligned}$$

Bindningsenergin är alltså ungefär 0,28 eV, mitt i intervallet 0,1–0,4 eV.

c)

$$\frac{0,28 \text{ eV}}{0,0259 \text{ eV}} \approx \boxed{11}$$

Vätebindningen är ungefär tio gånger starkare än den termiska energin. Det räcker för att bindningarna ska spela stor roll, men inte för att varje enskild bindning ska överleva länge i flytande vatten.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

☰ Exempel – Vätebindningar ur smält- och ångbildningsvärmets

I is deltar varje vattenmolekyl i fyra vätebindningar, och varje bindning delas av två molekyler. När isen smälter och vattnet sedan kokar bryts i stort sett alla bindningarna. Smältvärmets är 333 kJ/kg, ångbildningsvärmets 2260 kJ/kg och molmassan 18,02 g/mol. a) Hur mycket energi krävs per molekyl för att först smälta isen och sedan förång vattnet? b) Uppskatta energin per vätebindning. c) Hur stor andel av bindningarna bryts redan när isen smälter, om smältvärmets också går åt till att bryta vätebindningar?

Lösning

a) Energin per molekyl är värmets per kilogram gånger massan för en molekyl, M/N_A :

$$E_{\text{molekyl}} = \frac{(L_f + L_v) M}{N_A} = \frac{2593 \cdot 10^3 \cdot 0,01802}{6,022 \cdot 10^{23}} \text{ J}$$

$$= 7,76 \cdot 10^{-20} \text{ J} = \boxed{0,48 \text{ eV}}$$

Fysika: T g3 (L_f, L_v), Te (N_A, e)

b) Fyra bindningar per molekyl, var och en delad av två, ger två bindningar per molekyl:

$$E_{\text{bindning}} \approx \frac{0,48 \text{ eV}}{2} = \boxed{0,24 \text{ eV}}$$

Det stämmer med intervallet 0,1–0,4 eV och med punktladdningsmodellen i föregående exempel. Uppskattningen är grov: en del av värmets går till van der Waals-bindningarna mellan molekylerna och till volymarbetet när ångan bildas, så den överskattar energin per vätebindning något.

c) Smältvärmets andel av hela energin är

$$\frac{L_f}{L_f + L_v} = \frac{333}{2593} \approx \boxed{0,13}$$

Bara omkring 13 % av vätebindningarna bryts när is smälter, och resten bryts först vid förångningen. Flytande vatten är alltså fortfarande ett nätverk av vätebindningar, och därför är vattnets kokpunkt så hög.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 42.1 Types of Molecular Bonds