

Van der Waals-bindning

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #molekylfysik #fenomen

Kurs: F0005T Förkunskaper: Dipolmoment, Jonbindning

Svaga elektrostatiska bindningar mellan atomer eller molekyler med partiella laddningar, i fyra varianter av avtagande styrka. Jon-dipol verkar när salt löser sig i vatten. Dipol-dipol är den grupp vätebindningen tillhör. Dipol-inducerad dipol uppstår när en molekyl med dipolmoment inducerar ett moment i en atom, som när H-Cl polariserar argon. Inducerad dipol-inducerad dipol, Londondispersion, är rent kvantmekanisk och verkar även mellan två heliumatomer. Var för sig är de svaga, men tillsammans kan de ge en stark bindning.

Formeln, symbol för symbol

$$U(r) = \underbrace{4\varepsilon}_{\substack{\varepsilon=\text{brunnens} \\ \text{djup}}} \left[\underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}}_{\substack{\text{repulsion när} \\ \text{molnen möts}}} - \underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6}_{\substack{\text{London-} \\ \text{attraktion}}} \right]$$

Den branta r^{-12} -termen vinner på kort avstånd och den mjukare r^{-6} -termen på långt avstånd. Emellan finns ett minimum, vid $2^{1/6}\sigma$ med djupet ε .

1. Fyra varianter och deras räckvidd

Alla fyra varianterna är växelverkan mellan laddningsfördelningar som inte tar ut varandra: en jon, ett permanent **dipolmoment** eller ett moment som induceras av grannen. Ju mindre laddning som är inblandad, desto svagare blir växelverkan och desto snabbare avtar den med avståndet r .

variant	exempel	avtar ungefär som
jon-dipol	Na ⁺ i vatten	$1/r^2$
dipol-dipol	HCl-HCl, vätebindning	$1/r^3$ vid fast orientering

variant	exempel	avtar ungefär som
dipol-inducerad dipol	HCl-Ar	$1/r^6$
inducerad-inducerad (London)	He-He, Ar-Ar	$1/r^6$

Varför $1/r^6$ för inducerade dipoler. En dipol p ger på avståndet r ett elektriskt fält av storleken

$$E \propto \frac{p}{r^3}$$

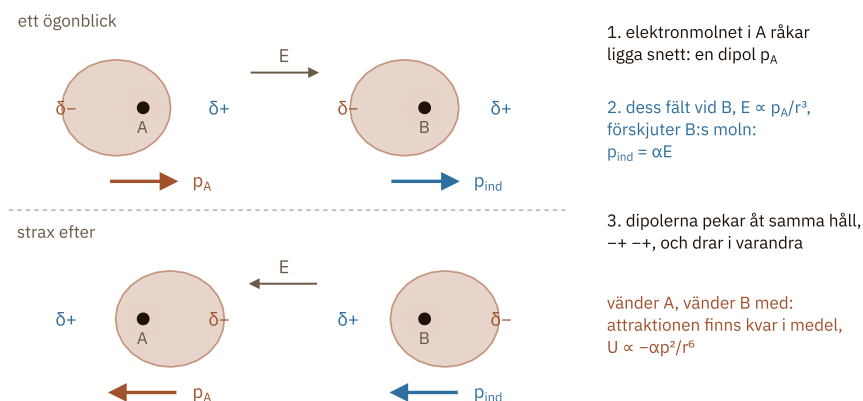
Fältet inducerar ett moment i grannatomen som är proportionellt mot fältet, med polariserbarheten α :

$$p_{\text{ind}} = \alpha E \propto \frac{\alpha p}{r^3}$$

Energin för det inducerade momentet i fältet blir

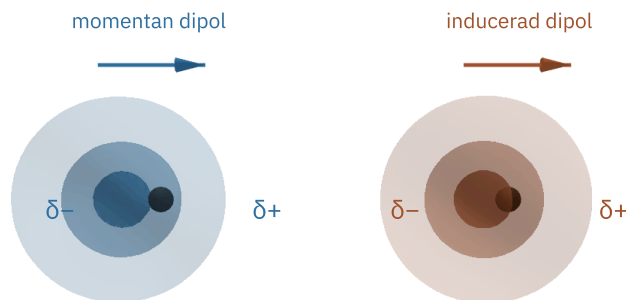
$$U \propto -p_{\text{ind}}E \propto -\frac{\alpha p^2}{r^6}$$

Ingen atom har ett permanent dipolmoment, men elektronmolnet fluktuerar hela tiden. Ett ögonblickligt moment i en atom inducerar ett moment i grannen, och växelverkan mellan dem är i medel attraktiv. Det är Londondispersionen, och den förklarar att ädelgaser och molekyler som H_2 , O_2 och N_2 alls kan bli flytande och fasta.



Londondispersion. Elektronmolnet i A fluktuerar och ger en ögonblicklig dipol, vars fält polariserar B åt samma håll. När A:s dipol vänder följer B med, så attraktionen finns kvar i medel.

Samma sak som elektronmoln: i ögonblicket är molnet i A förskjutet åt ena hållet, och fältet från A drar molnet i B åt samma håll.



dra för att vrida

Två ädelgasatomer i 3D (vrid med musen). Molnet i A är för ögonblicket förskjutet åt vänster, så A får en dipol med $\delta+$ mot B. Fältet drar B:s moln mot A, och B får en inducerad dipol åt samma håll. $\delta+$ i A och $\delta-$ i B ligger närmast varandra, så atomerna attraheras. Förskjutningen är kraftigt överdriven, och modellen är kvalitativ (förskjutna exponentiella moln, isoytor vid 50, 20 och 5 % av maxtätheten).

2. Lennard-Jones-potentialen

En vanlig modell för två neutrala atomer kombinerar attraktionen $\propto -1/r^6$ med en brant repulsion när elektronmolnen överlappar. Repulsionen väljs av räknetekniska skäl som $1/r^{12}$:

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Parametern σ är avståndet där $U = 0$, och ϵ är brunnens djup.

Härledning av minimum

Derivera.

$$\frac{dU}{dr} = 4\epsilon \left[-\frac{12\sigma^{12}}{r^{13}} + \frac{6\sigma^6}{r^7} \right]$$

Sätt lika med noll och multiplicera med $r^{13}/(24\epsilon\sigma^6)$:

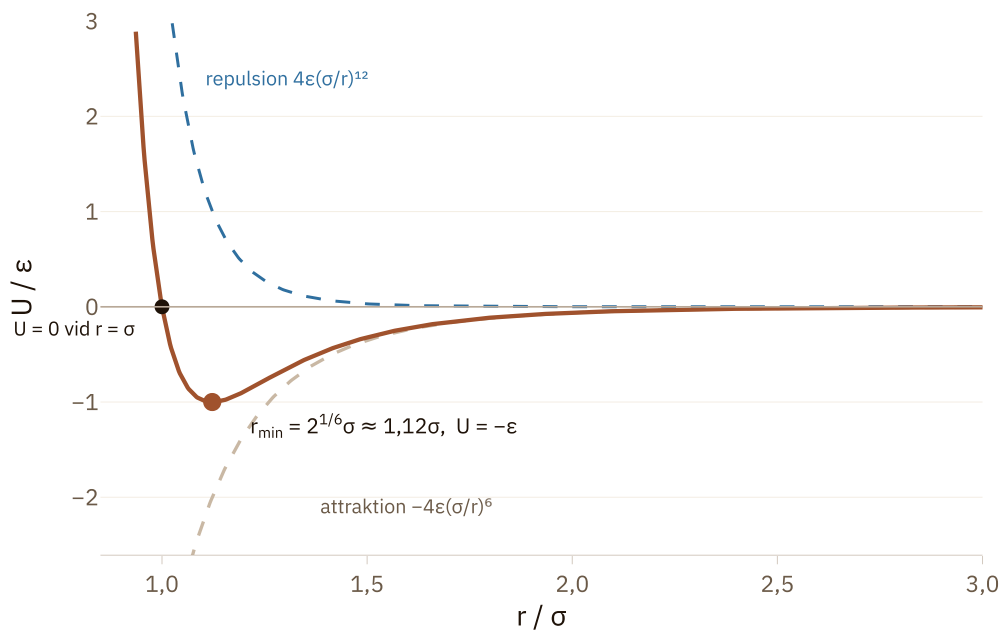
$$-2\sigma^6 + r^6 = 0 \quad \Rightarrow \quad r_{\min}^6 = 2\sigma^6$$

Energin i minimum. Där är $(\sigma/r_{\min})^6 = 1/2$:

$$U(r_{\min}) = 4\epsilon \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{2} \right] = -\epsilon$$

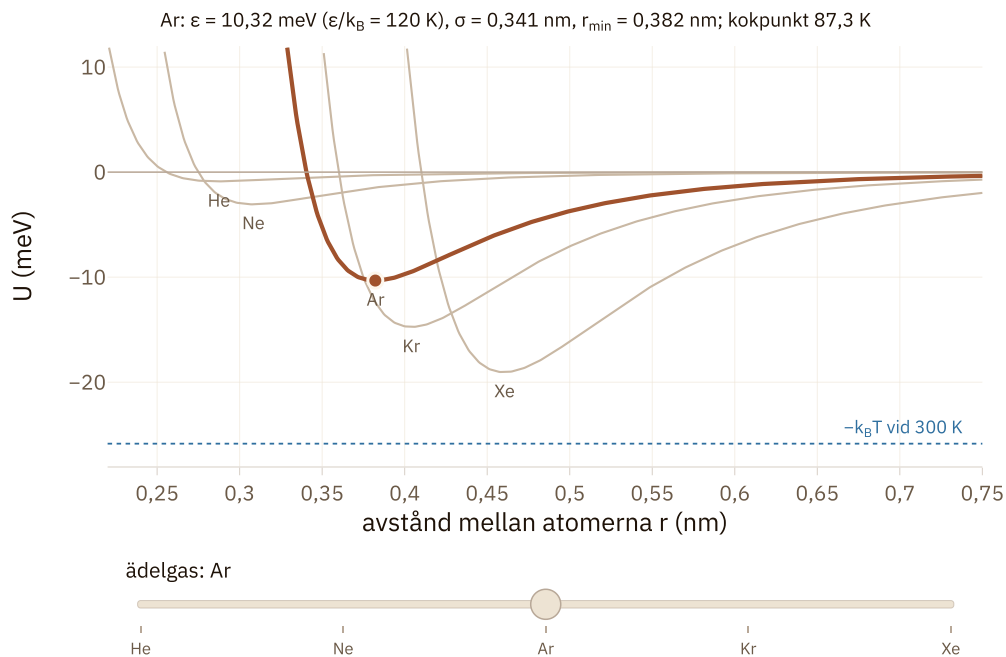
$$r_{\min} = 2^{1/6} \sigma \approx 1,12 \sigma \quad U(r_{\min}) = -\epsilon$$

Bindningsenergin är alltså ϵ och jämviktsavståndet något större än σ .



Lennard-Jones-potentialen i dimensionslösa enheter. Den repulsiva termen dominerar innanför $r = \sigma$, den attraktiva utanför. Minimum ligger vid $2^{1/6}\sigma$ med djupet ϵ .

Parametrarna växer nedåt i ädelgasgruppen. Större atomer har fler och löst bundna elektroner, som är lättare att polarisera, så brunnen blir djupare och flyttas utåt.



Lennard-Jones-potentialen för ädelgaserna, med reglage för gasen. Brunnen djupnar från knappt 1 meV för He till 19 meV för Xe, och kokpunkten följer med: för Ne–Xe ligger den vid ungefär $0,7\text{--}0,8$ gånger ϵ/k_B . Den prickade linjen är $-k_B T$ vid rumstemperatur, djupare än alla brunnarna. Parametrarna är typiska tabellvärden, kokpunkterna från Fysika T g3.

3. Vätebindning

Vätebindningen är en särskilt stark variant. En väteatom som är kovalent bunden till en elektronegativ atom, som syre eller kväve, har fått sin elektron förskjuten så mycket att den nästan är en naken proton. Protonen är mycket mindre än någon annan positiv jon och kan därför komma riktigt nära en annan molekyl, polarisera den och binda de två molekylerna till varandra.

- Bindningsenergin är oftast under $0,5 \text{ eV}$, större än för vanlig van der Waals-bindning men mindre än för starka bindningar.
- Den håller ihop de två strängarna i DNA, tvärbinder långa polymerkedjor och bidrar tillsammans med van der Waals-krafter till strukturen i is.
- Bara väte kan bilda den, eftersom bara väte blir en ren kärna när elektronen dras bort.

Mer om vätebindningen, med vatten, is och DNA, i [Vätebindning](#).

4. Energiskalan mot $k_B T$

Om bindningen håller avgörs av jämförelsen med den termiska energin $k_B T$. Vid 300 K är

$$k_B T = \frac{1,381 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{1,602 \cdot 10^{-19}} \text{ eV} = 0,0259 \text{ eV}$$

Fysika: Te

Starka bindningar på 1–5 eV är långt över det och bryts inte av värmerörelse. Van der Waals-bindningar på 0,1 eV eller mindre ligger bara några gånger över, eller under, $k_B T$. Därför är ämnen som bara hålls ihop av van der Waals-krafter flytande eller fasta först vid låga temperaturer. Se också [Temperatur och värme](#).

Vanliga fel

- **σ tas som jämviktsavståndet.** Vid $r = \sigma$ är $U = 0$. Minimum ligger vid $2^{1/6}\sigma \approx 1,12\sigma$.
- **Bindningsenergin tas som 4ϵ .** Faktorn 4 står framför parentesen, men djupet i minimum är ϵ .
- **Van der Waals tros kräva polära molekyler.** Londondispersionen verkar mellan alla atomer, även helium, eftersom den bygger på fluktuerande dipoler.
- **Vätebindning tros vara en kovalent bindning till väte.** Den kovalenta O–H-bindningen finns inom molekylen. Vätebindningen är den svaga bindningen *mellan* molekyler.
- **meV och eV blandas.** ϵ för ädelgaser ligger kring $10 \text{ meV} = 0,01 \text{ eV}$.

5. Lösta exempel

Exempel – Argon

Växelverkan mellan två argonatomer beskrivs med Lennard-Jones-potentialen med $\epsilon = 0,0104 \text{ eV}$ och $\sigma = 0,340 \text{ nm}$. a) Bestäm jämviktsavståndet. b) Bestäm bindningsenergin i meV. c) Vid vilken temperatur är $k_B T = \epsilon$? Jämför med att argon stelnar vid ungefär 84 K.

Lösning

a)

$$r_{\min} = 2^{1/6} \cdot 0,340 \text{ nm} = 1,1225 \cdot 0,340 \text{ nm} = \boxed{0,382 \text{ nm}}$$

b) Bindningsenergin är brunnens djup:

$$E_B = \epsilon = 0,0104 \text{ eV} = \boxed{10,4 \text{ meV}}$$

c)

$$T = \frac{\varepsilon}{k_B} = \frac{0,0104 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}} \approx \boxed{121 \text{ K}}$$

Vid 84 K är $k_B T = 7,24 \text{ meV}$, alltså av samma storlek som ε men något mindre. Det stämmer med att argon blir fast just där värmerörelsen inte längre räcker för att bryta de svaga bindningarna. Vid rumstemperatur är $k_B T$ två och en halv gånger ε , och argon är en gas.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Se jämförelsen i [6. Bindningstyperna jämförda](#).

Läsning

- 42.1 Types of Molecular Bonds