

Wykład I. Wiązania chemiczne.

Podstawowe pytanie, które wymaga odpowiedzi gdy zajmujemy się materia w stałym stanie skupienia jest pytanie o naturę sił, które utrzymują atomy i cząsteczki w określonym obszarze przestrzeni nadając ciału odpowiedni kształt a także określają inne właściwości mechaniczne. Okazuje się, że od natury tych sił zależą także przewodnictwo elektryczne, podatności elektryczne i magnetyczne, zdolności pochłaniania i emisji światła a także szereg innych właściwości materii.

W zasadzie nie mamy wątpliwości, że siły nadające ciału określony kształt w większości przypadków mają naturę elektromagnetyczną i związane są ze specyficznym rozkładem ładunków w atomach i cząsteczkach tworzących ciało stałe. Samo zaś oddziaływanie powodujące utrzymanie się substancji w całości nazywamy wiązaniem chemicznym. Rozróżnia szereg oddziaływań (w trakcie wykładu omówionych zostanie pięć z nich), które są odpowiedzialne za tworzenie się wiązań.

Definiujemy **energię kohezji (spójności)** jako energię, którą trzeba dostarczyć aby rozłożyć kryształ na zbiór swobodnych atomów o tej samej konfiguracji elektronowej, znajdujących się w spoczynku nieskończenie daleko od siebie.

Energię sieci definiuje się dla kryształów jonowych jako energię, która jest potrzebna aby rozłożyć kryształ na odpowiedni zbiór jonów.

Typ wiązań chemicznych zależy na ogół z właściwościami atomów tworzących ciała stałe.

W przypadku gdy mamy do czynienia z atomami zamknięto powłokowymi (zewnętrzna walencyjna powłoka elektronowa jest całkowicie zapełniona), bardzo trudno jest oderwać elektrony od atomów. Atomy nie posiadają wypadkowego ładunku elektrycznego. Możliwa jest jednak polaryzacja poszczególnych atomów i kryształ utrzymuje się w całości w skutek istnienia przyciągania pomiędzy momentami dipolowymi. Z wiązaniem tego typu, nazywanym wiązaniem **van der Waalsa – Londona** mamy do czynienia w przypadku kryształów pierwiastków szlachetnych, takich jak Ne, Ar, Kr, Xe.

Jeśli substancja zbudowana jest z atomów, które posiadają jeden lub co najwyżej dwa elektrony walencyjne wówczas elektrony te, będąc słabo związane z poszczególnymi atomami tworzą chmurę ładunku ujemnego wokół dodatnio naładowanych jonów. Takie rozdzielone ładunki przyciągają się, utrzymując ciało stałe w całości. Wiązanie to nosi nazwę **wiązania metalicznego**. Typowymi przykładami są kryształy miedzi, srebra i złota, a także innych metali. Wysoka przewodność elektryczna metali związana jest właśnie z istnieniem swobodnych, lub prawie swobodnych elektronów.

Innym przykładem są kryształy związków chemicznych, w których jednemu ze składników brakuje pojedynczego elektronu do zapełnienia powłoki walencyjnej, drugi zaś posiada tylko jeden walencyjny elektron. Przykładem może tu być kryształ NaCl. Sód ma jeden chlor zaś siedem elektronów walencyjnych. W kryształcie NaCl elektron przechodzi od Na do Cl, tworząc się parę przyciągających się wzajemnie jonów Na^+ i Cl^- . Wiązanie to nosi nazwę **wiązania jonowego**.

Odrębny typ oddziaływań pojawia się gdy kryształ tworzony jest przez atomy posiadające w połowie wypełnione powłoki walencyjne. Przykładami mogą być kryształ diamentu, krzemu lub germanu. Atomy te posiadają po cztery elektrony walencyjne. Tworząc kryształ każdy atom łączy się z czterema najbliższymi sąsiadami dostarczając do każdego z tak powstałych wiązań po jednym elektronie. W ten sposób na każde pojedyncze wiązanie pomiędzy dwoma jonami przypada po dwa elektrony. Tworzone w ten sposób wiązanie nazywa się **wiązaniem kowalencyjnym**. Natura sił utrzymujących kryształ w całości tylko częściowo ma tu charakter elektrostatyczny. Główny czynnik związany jest z kwantowym efektem tworzenia się orbitali wiążących i antywiązących oraz faktem ich połowicznego wypełnienia przez elektrony walencyjne.

Podobnie kwantowy charakter ma **wiązanie wodorowe**, występujące na ogół w cząsteczkach związków organicznych. Atom wodoru podobnie jak metale może oddać swój jedyny elektron walencyjny. Ponieważ to co pozostaje to tylko pojedynczy proton o znikomym objętości może pojawiać się w praktycznie w każdym miejscu powodując pojawienie się siły przyciągających ujemne jony lub grupy jonów.

W rzeczywistości na ogół nie mamy do czynienia ze ściśle określonym jednym typem wiązania. Dotyczy to w zasadzie wszystkich typów wiązań, jednak w największym stopniu wymieszane są wiązanie kowalencyjne i jonowe.

Aby lepiej zrozumieć naturę poszczególnych wiązań warto przeanalizować proces powstawania kryształu w sposób ilościowy, czyli przedstawiając energię potencjalną układu w funkcji odległości pomiędzy atomami. Gwałtowny rozwój technik obliczeniowych chemii kwantowej oraz mocy obliczeniowej komputerów pozwalają przeprowadzić dla wielu związków chemicznych bardzo precyzyjne obliczenia metodą z pierwszych zasad, nadal jednak pożyteczna jest analiza prostych modeli fenomenologicznych, dla których wartości parametrów opisujących energię potencjalną układu bierze się z doświadczenia.

Rozważając procesy prowadzące do utworzenia ciał stałych należy brać pod uwagę dwa rodzaje sił. Pierwszy rodzaj oddziaływania to oddziaływanie przyciągające, które powoduje, że atomy tworzące kryształ pozostają blisko siebie pomimo drgań termicznych. Drugie oddziaływanie to oddziaływanie odpychające, które nadaje ciału sprężystość.

O ile oddziaływanie przyciągające powodujące pojawienie się sił spójności można obliczyć na gruncie klasycznej elektrodynamiki rozważając ładunki w kryształach o tyle natura oddziaływania prowadzącego do pojawienia się sił odpychających nie jest tak jednoznaczna. W dużym stopniu oddziaływanie to wynika z kwantowej natury atomów i elektronów a także jest konsekwencją zasady nieoznaczoności. Zbliżając do siebie atomy zmniejszamy rozmiary układu. To z kolei powoduje wzrost nieoznaczoności pędu. Większa nieoznaczoność pędu to większa energia kinetyczna. W konsekwencji, zupełnie niezależnie od oddziaływań elektrostatycznych, gdy zbliżamy do siebie dwa atomy musimy podwyższyć ich energię. Z kolei fakt, że każdy układ dąży do osiągnięcia jak najmniejszej energii powoduje w tym przypadku pojawienie się siły odpychającej.

Kwantowa natura oddziaływania odpychającego powoduje, że jest ono w przybliżeniu takie same, niezależnie od rodzaju sił spójności.

Potencjał powodujący pojawienie się siły odpychającej wyraża się przy pomocy wzorów empirycznych. Najczęściej stosuje się wyrażenia typu:

$$U^+(R) = \lambda \cdot e^{-\frac{R}{\rho}} \quad (\text{I.1})$$

lub

$$U^+(R) = 4\varepsilon \cdot \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} \quad (\text{I.2})$$

Znak (+) pojawia się dlatego, że jest to potencjał dodatni. W obu przypadkach R jest odległością pomiędzy atomami (jonami), zaś pozostałe wielkości są parametrami empirycznymi, których wartości bierze się z doświadczenia (σ i ρ są pewnymi charakterystycznymi odległościami, zaś ε i λ są stałymi określającymi wielkość potencjału.)

Rozważając wyrażenia (I.1) i (I.2) zauważamy, że nie są one sobie równoważne. W szczególności widzimy, że dla odległości pomiędzy najbliższymi sąsiadami dążącej do zera energia dana przez zależność (I.2) dąży do nieskończoności podczas gdy energia dana przez wyrażenie (I.1) pozostaje skończona. Wydaje się, że bardziej realne jest wyrażenie (I.1) (na ogół unika się teorii, które prowadzą do nieskończonych wartości wielkości fizycznych), jednak w zakresie wartości R , które odpowiadają odległościom międzyatomowym w kryształach obie zależności są bardzo podobne i dobrze opisują rzeczywistość. Na przykładzie wzorów (I-1) i (I-2) widać, że modele (teorie) fizyczne mają na ogół ograniczony zakres stosowania, w którym są prawdziwe.

Wiązanie jonowe:

Ważnym przykładem wiązania krystalicznego jest wiązanie jonowe. Wiązanie to jest charakterystyczne dla szeregu związków chemicznych. Tworzy się ono wówczas gdy po zbliżeniu do siebie atomy jednego pierwiastka oddają elektrony, drugiego zaś przyjmują. Są to związki metali alkalicznych takich jak Li, Na, K, Rb wraz z F, Cl, Br, I. Przykładem może być kryształ soli kuchennej NaCl. Jony metalu oddają swój jedyny elektron walencyjny n_s (n to główna liczba kwantowa, s odpowiada orbitalowi atomowemu typu s) atomowi fluoru, chloru, bromu lub jodu, gdzie uzupełnia powłokę $m_s^2 m_p^5$. W ten sposób powstają jony dodatnie i ujemne pomiędzy którymi działa siła przyciągania elektrostatycznego.

Energia potencjalna dwóch jonów, oznaczonych indeksami 'i' i 'j' jest równa

$$U_{ij}^- = -\frac{q^2}{R_{ij}} \quad (\text{I.3})$$

gdzie R_{ij} jest odległość pomiędzy jonami, zaś q ładunkiem jonów.

Całkowita energia potencjalna i -tego jonu, wynikająca z istnienia wszystkich pozostałych jonów w kryształach, U_i , jest równa sumie tych energii po wszystkich jonach.

$$U_i^- = \sum_j U_{ij} = q^2 \sum \frac{\pm}{p_{ij} R} = \frac{-q^2 \alpha}{R} \quad (\text{I.4})$$

We wzorze (I.4) wykorzystano fakt, że odległość pomiędzy dwoma dowolnymi jonami i i j można wyrazić przy pomocy odległości pomiędzy najbliższymi sąsiadami, R

$$R_{ij} = R \cdot p_{ij} \quad (\text{I.5})$$

Współczynniki p_{ij} są zawsze większe od jedności, w ten sposób suma szeregu

$$\alpha = \sum_j \frac{\pm 1}{p_{ij}} \quad (\text{I.6})$$

ma zawsze wartość skończoną. Stałą tą nazywamy **stałą Madelunga**.

Dodając dodatnia i ujemna energię układu daną przez wzory (I.1) i (I.4) otrzymuje się wyrażenie na zależność całkowitej energii przypadającej na parę jonów od odległości pomiędzy jonami w kryształach.

$$U(R) = U^+(R) + U^-(R) = Z(\lambda \cdot e^{-\frac{R}{\rho}} - \frac{q^2 \alpha}{R}) \quad (\text{I.7})$$

Z jest ładunkiem jonów. Ze względu na to, że energia dowolnej pary jest taka sama we wzorze (I.7) pominięto indeks i . Całkowitą energię spójności kryształu otrzymuje się mnożąc energię (I.7) przez ilość par jonów N .

Wartości stałej Madelunga oraz stałych λ i ρ dla poszczególnych kryształów można znaleźć w podręcznikach (1) C. Kittel, Wstęp do Fizyki Ciała Stałego, PWN W-wa 1974, str 112)

Wiązanie van der Waalsa – Londona

Atomy gazów szlachetnych (Ne, Ar, Kr, Xe) mają całkowicie zapełnioną powłokę elektronów walencyjnych $ns^2 np^6$. Z tego powodu nie wchodzi one w reakcje chemiczne z innymi substancjami. W niskich temperaturach gazy te ulegają skropleniu a w jeszcze niższych przechodzą w stały stan skupienia tworząc kryształy. Atomy gazów szlachetnych pozostają elektrycznie obojętne tworząc ciało stałe. Skoro siły spójności takiego kryształu nie mogą pochodzić od całkowitych ładunków jonów ani od wiązania kowalencyjnego należy rozważyć inne oddziaływania. Najważniejsze to polaryzacja, która przesuwa ładunki ujemne chmury elektronów i dodatnie jąder atomowych, nie zmieniając przy tym całkowitego ładunku atomu. Przypadkowe drgania termiczne atomów mogą powodować ich spontaniczną polaryzację. Dzięki rozsunięciu ładunków atomu uzyskuje elektryczny moment dipolowy. Podczas tego wykładu posłużymy się momentem dipolowym przypadającym na objętość atomu, V_0 . Wielkość ta zdefiniowana jest następująco:

$$p = \frac{q \cdot \Delta x}{V_0} \quad (\text{I.8})$$

gdzie q jest ładunkiem a Δx jest przesunięciem ładunku.

Pole elektryczne w odległości R od tego dipola będzie w przybliżeniu dane przez relację:

$$E \approx 2 \frac{P}{R^3} \quad (\text{I.9})$$

Pole to z kolei będzie polaryzowało kolejne atomy (indukcja elektryczna) . Tak więc w odległości R od dipola p indukowany będzie elektryczny moment dipolowy p' .

$$p_i' = \alpha E \approx 2\alpha \frac{p_j}{R_{ij}^3} \quad (\text{I.10})$$

Należy zwrócić uwagę , że stała α występująca we wzorach (I.10) nie jest stałą Madelunga lecz polaryzowalnością kryształu (polaryzowalność definiujemy jako współczynnik proporcjonalności pomiędzy indukowanym elektrycznym momentem dipolowym a natężeniem wywołującego go pola elektrycznego)

R_{ij} jest odległością pomiędzy atomami. Można obliczyć energię momentu dipolowego p_i' w polu elektrycznym pochodzącym od momentu dipolowego p_j . Energia ta jest ujemna i wynosi:

$$U^{(-)}(R_{ij}) = -p_i' E \approx -\frac{2p_i' p_j}{R_{ij}^3} \approx -\frac{4\alpha p_i}{R_{ij}^6} \quad (\text{I.11})$$

Często zamiast wielkość $4\alpha p$ zastępuje się jedną stałą C lub $4\epsilon\sigma^{1/6}$ i wówczas

$$U^{(-)}(R_{ij}) = -\frac{C}{R_{ij}^6} = -4\epsilon\left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^6 \quad (\text{I.12})$$

Warto w tym miejscu zwrócić uwagę na szczególnie przykład oddziaływania dwóch obojętnych atomów. Biorąc pod uwagę energię dodatnią daną wzorem (I.2) i ujemną energię daną wzorem (I.12) otrzymamy energię oddziaływania dwóch atomów w postaci :

$$U(R_{ij}) = U^{(+)}(R_{ij}) + U^{(-)}(R_{ij}) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^6\right] \quad (\text{I.13})$$

znaną jako **potencjał Lennarda –Jonesa**. Wzór ma znaczenie historyczne i był używany zarówno do opisu ciała stałego jak i zderzeń atomów w gazie.

Aby otrzymać energię przypadającą na dwa atomy w kryształach należy dodać wszystkie przyczynki (relacja I.9). Postępując podobnie jak w przypadku wiązań jonowych otrzymamy

$$U(R) = 4\epsilon[A\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - B\left(\frac{\sigma}{R}\right)^6] \quad (\text{I.14})$$

Gdzie $A = \sum_j \left(\frac{1}{p_{ij}}\right)^{12}$ i $B = \sum_j \left(\frac{1}{p_{ij}}\right)^6$.

Należy podkreślić, że w przypadku wiązania van der Waalsa- Londona tak jak i w przypadku wiązania jonowego potencjał dodatni odpowiedzialny za odpychanie jonów może być wyrażony przez równanie (I.1) (W praktyce potencjały (I.1) i (I.2) mogą być stosowane zamiennie). Wówczas wyrażenie (I.14) może być zastąpione przez

$$U(R) = Z[\lambda \cdot e^{-\frac{R}{\rho}} - b\left(\frac{\sigma}{R}\right)^6] \quad (\text{I.15})$$

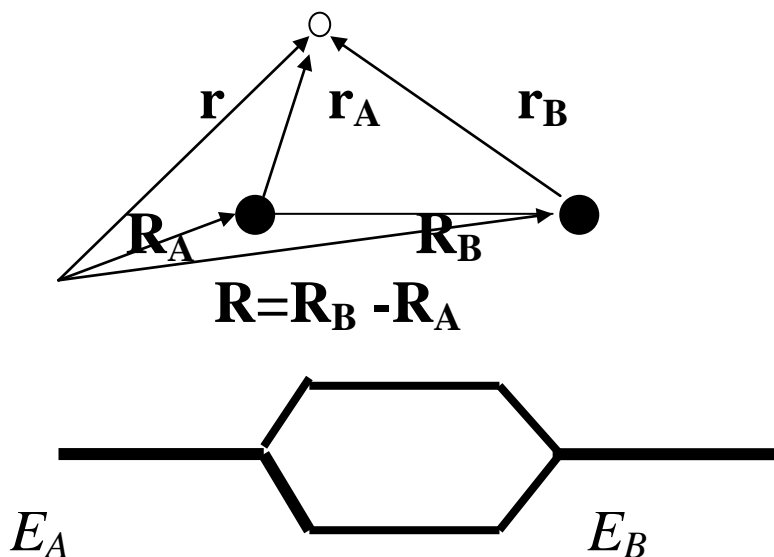
We wzorze (I.15) współczynnik b może być łatwo obliczony $b = 4\epsilon B / Z$.

Wiązanie kowalencyjne.

Tak jak wspomniano wiązanie kowalencyjne ma charakter kwantowy i nie może być opisane przy pomocy klasycznych sił przyciągania elektrostatycznego. Rozważmy najprostszy przypadek cząsteczki dwuatomowej składającej się z dwóch identycznych atomów: atomu A i atomu B (np cząsteczka wodoru). Schematycznie cząsteczka jest przedstawiona na Rysunku I.1 Załóżmy dalej, że każdy atom wnosi jeden elektron do wiązania (jest to oczywiste w przypadku cząsteczki wodoru). Jeśli atomy znajdują się daleko od siebie wówczas oba elektrony mają taką samą energię E

$$E = E_A = E_B \quad (\text{I.16})$$

Rys. I.1 schemat tworzenia się wiązania kowalencyjnego cząsteczki dwuatomowej.



$$\mathbf{r}_A = \mathbf{r} - \mathbf{R}_A$$

$$\mathbf{r}_B = \mathbf{r} - \mathbf{R}_B$$

W mechanice kwantowej energie te oblicza się jako wartości oczekiwane hamiltonianów (operatorów Hamiltona) H_A i H_B

$$\begin{aligned} E_A = H_{AA} &= \int dr \varphi_A^* H_A \varphi_A \\ E_B = H_{BB} &= \int dr \varphi_B^* H_B \varphi_B \end{aligned} \quad (\text{I.17})$$

gdzie odpowiednie hamiltoniany wyrażone są następująco

$$\begin{aligned} H_A &= \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r_A) \\ H_B &= \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r_B) \end{aligned} \quad (\text{I.18})$$

a φ_A i φ_B są funkcjami falowymi elektronów w atomach A i B. Zbliżając atomy do siebie musimy uwzględnić, że elektrony przestaną być przyporządkowane poszczególnym atomom. Inaczej mówiąc każdy z

elektronów porusza się w polu obu atomów .(Dla uproszczenia rachunków nie uwzględnimy dalej energii odpychania obu elektronów i energii odpychania jąder).

W języku mechaniki kwantowej fakt ,że elektrony są wspólne dla obu atomów uwzględnia się wprowadzając całkowity hamiltonian pojedynczego elektronu jako sumę energii kinetycznej oraz energii potencjalnej pochodzącej od oddziaływania z atomami A i B . Hamiltonian taki ma następującą postać:

$$H = \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r_A) + U(r_B) \quad (I.24)$$

Obecnie nowe stany dozwolone układu dwu atomów będą opisywane przez funkcje będące kombinacjami liniowymi φ_A i φ_B

$$\Phi = \alpha\varphi_A + \beta\varphi_B \quad (I.25)$$

Równanie Shrödingera w postaci :

$$\left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r_A) + U(r_B) \right] \Phi = E\Phi \quad (I.26)$$

zastępuje się układem równań :

$$\begin{aligned} \alpha[E_A - E + H_{BA}] + \beta[(E_B - E)S_{BA} + H'_{BA}] &= 0 \\ \alpha[(E_A - E)S_{AB} + H'_{AB}] + \beta[E_B - E + H_{AB}] &= 0 \end{aligned} \quad (I.27)$$

Gdzie

$$\begin{aligned} H_{IJ} &= \int \varphi_J^*(r_J) U(r_J) \varphi_I dr \\ H'_{IJ} &= \int \varphi_J^*(r_J) U(r_I) \varphi_I dr \\ S_{IJ} &= \int \varphi_J^*(r_J) \varphi_I dr \end{aligned} \quad (I.28)$$

Układ (i. 27 ma rozwiązanie gdy jego wyznacznik równa się zero , czyli

$$[E_A - E + H_{BA}][E_B - E + H_{AB}] - [(E_B - E)S_{BA} + H'_{BA}][(E_A - E)S_{AB} + H'_{AB}] = 0 \quad (I.29)$$

Równanie (I.29) jest równaniem kwadratowym i posiada dwa rozwiązania. Wartości liczbowe energii E_+ i E_- można obliczyć la ogólnego przypadku dowolnych atomów . bardzo prosto rozwiązuje się je gdy mamy dwa takie same atomy . Wówczas

$$E_A = E_B = E_0$$

$$H_{IJ} = H_{JI}$$

$$H'_{IJ} = H'_{JI}$$

W takiej sytuacji otrzymujemy

$$\begin{aligned} E_+ &= \frac{E_0 + H_{AB} + H'_{BA}}{1 + S_{AB}} \\ E_- &= \frac{E_0 + H_{AB} - H'_{BA}}{1 - S_{AB}} \end{aligned} \quad (I.23)$$

Widać, że choć energie E_A i E_B są sobie równe to na ogół energie E_+ i E_- różnią się między sobą. O ile choć jedna z nich jest mniejsza niż E_A lub E_B atomy będą łączyć się w cząsteczki. **Stan o niższej energii nazywa się stanem wiążącym a stan o wyższej energii stanem antywiązącym. Odpowiednie funkcje falowe noszą nazwę orbitalu wiążącego i antywiązącego.**

Na ogół mamy do czynienia z wiązaniem mieszanym jonowo –walencyjnym. Stopień jonowości wiązania określa się porównując elektroujemności pierwiastków tworzących związek. Im większa różnica elektroujemności tym bardziej jonowe jest wiązanie. Elektroujemność X definiuje się jako

$$X = 0.184(I + A) \quad (I.24)$$

gdzie I jest energia jonizacji, A jest powinowactwem elektronowym.

Energia jonizacji to energia potrzebna do oderwania elektronu od atomu danego pierwiastka, który staje się **kationem**. **Powinowactwo elektronowe** to energia, która się wydzieli gdy atom pierwiastka przyłączy jeden elektron i staje się **anionem**

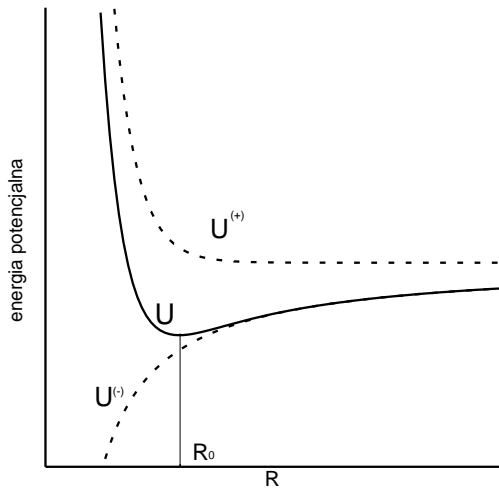
Stała sieci, energia spójności.

Porównując wzór (I.7) i (I.15) można otrzymać uogólnione wyrażenie na energię potencjalną atomów (jonów) w sieci krystalicznej

$$U(R) = Z[\lambda \cdot e^{-\frac{R}{\rho}} - b\left(\frac{\sigma}{R}\right)^n] \quad (I.25)$$

gdzie wartość wykładnika potęgi zależy od rodzaju wiązania i wynosi 6 dla wiązania van der Waalsa oraz 1 dla wiązania jonowego. W ogólności liczba ta może być dowolna i często jest parametrem dopasowania teorii do eksperymentu. Stałe b i σ dla wiązania jonowego to odpowiednio q^2 i α .

Funkcja dana wzorem (I.24) ma minimum w punkcie R_0 , który odpowiada rzeczywistej odległości pomiędzy jonami.



Rysunek I-2 Krzywymi przerywanymi potencjały U^+ i U^- , krzywą ciągłą przedstawiono potencjał wypadkowy

Na rysunku (I-2) przedstawiono zależność energii potencjalnej od wzajemnej odległości pomiędzy jonami. Aby obliczyć R_0 należy wykorzystać warunek na minimum funkcji

$$\frac{dU(R)}{dR} = 0 \quad (I.26)$$

z warunku tego otrzymuje się

$$\lambda \cdot e^{-\frac{R_0}{\rho}} = \frac{nb\rho}{\sigma} \left(\frac{\sigma}{R_0}\right)^{n+1} \quad (I.27)$$

Stąd wartość energii w minimum potencjału wynosi

$$U(R_0) = Zb\left(\frac{\sigma}{R_0}\right)^n \left[\frac{n\rho}{R_0} - 1\right] \quad (I.28)$$

Wracając do wcześniej zdefiniowanych wielkości opisujących wiązanie jonowe i van der Waalsa otrzymamy odpowiednio

$$U(R_0) = Z\left(\frac{q^2\alpha}{R_0}\right) \left[\frac{\rho}{R_0} - 1\right] \quad (I.29)$$

dla wiązania jonowego i

$$U(R_0) = 4\varepsilon B\left(\frac{\sigma}{R_0}\right)^6 \left[\frac{6\rho}{R_0} - 1\right] \quad (I.30)$$

dla wiązania van der Waalsa – Londona.

Wartość stałej charakteryzującej potencjał odpychający, ρ , nie zależy od tego jaki jest typ wiązania i wynosi ok 0.1 wartości R_0 . Stąd i ze wzorów (I.27) i (I.26) wynika, że energia spójności wiązania jonowego jest znacznie większa niż wiązania van der Waalsa. Następnym czynnikiem decydującym o tym, że wiązanie van der Waalsa jest słabsze jest wartości stałych opisujących potencjały, ϵ , B i σ oraz Zq^2 i α . W rzeczywistości energia przypadająca na parę jonów w kryształ jonowym wynosi około 5eV podczas gdy w kryształach van der Waalsa tylko ok około 0.1 eV. Konsekwencją małej energii spójności w kryształach van der Waalsa jest ich niska temperatura topnienia. Kryształy gazów szlachetnych istnieją tylko w bardzo niskich temperaturach, nie wyższych niż kilkadziesiąt kelwinów. Kryształy jonowe, w których energia spójności jest o dwa rzędy większa mają bardzo wysokie temperatury topnienia (rzędu 1000K).