



第 1 單元

牙科材料物理化學性質

牙科材料學是材料科學應用於牙醫學領域的專屬知識，雖以牙醫應用為主體，但材料的性質取決於結構，透過不斷地實驗可發現即使是同一種成分的材料，當其結構不同時，性質(property)便有明顯差別，如圖 1-1 的二氧化矽(SiO_2)的結晶示意圖，雖然都是二氧化矽，但因原子排列方式的差異，而有不同的結構與特性。因此仍應具備基礎的材料科學概念，本單元包含基礎材料科學及其衍生之相關物理化學性質。

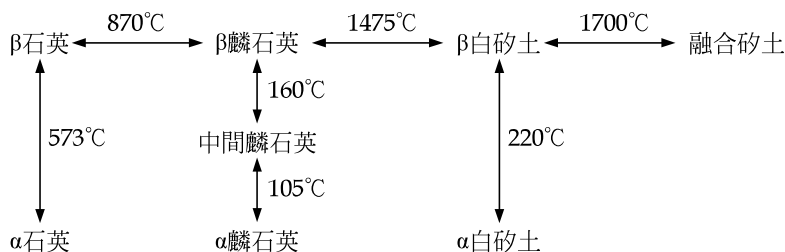


圖 1-1 二氧化矽相變化結構示意圖

壹、原子結構

一、原子結構

二十世紀初期，紐西蘭科學家拉瑟福(Ernest Rutherford, 1871~1937)由實驗結果推論出：

1. 原子的結構由位居中心、體積極小而質量很大的一個原子核（帶正電），與環繞此原子核做旋轉運動並帶負電的電子所構成。
2. 原子核本身則由帶正電的質子和不帶電的中子所構成。



二、原子序與質量數

1. 在化學元素週期表中，所有元素皆依其原子序(atomic number)依次排列，原子序即為原子的質子數，若元素處於電中性的情況下（電子數等於質子數），此時原子序亦可以電子數表示。
2. 原子核內質子和中子的數目總和稱為質量數(mass number)；因電子的重量與質子及中子比較，顯得相當輕，可忽略不計，許多時候，量數可約略代表原子量。X 代表元素的符號，以 Z 代表原子序，以 A 代表質量數，則元素 X 可記為 A_ZX 。而原子量表示 6.023×10^{23} 個原子的重量，以碳 12 原子質量的 1/12 為 1 個單位(amu)。
3. 質子數（或原子序）相同，但質量數（或中子數）不同的原子稱為同位素(isotope)。

三、原子中電子的轉移

1. 原子因核內的質子數和核外的電子數相等故為電中性，而物質會帶電是電子轉移的結果。
2. 原子因摩擦或其他原因失去電子，核內質子數多於核外電子數，則此一原子成為帶正電的粒子，即陽離子。
3. 若一電中性原子從外界獲得電子，使質子數少於電子數，則變成帶負電的粒子，即陰離子。

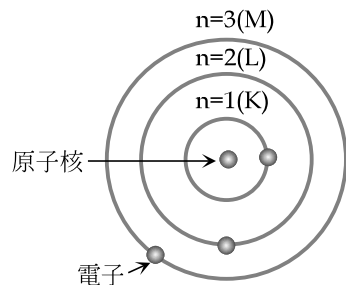


圖 1-2 原子模型

四、電子能階與軌域

原子核外有數層能量軌域，每層軌域有一定數目的電子和依照距離成階梯狀變化的能量，因此各層內電子所具有的能量不同，愈接近原子核的電子能量愈低，愈遠則電子能量愈高。每個原子核外的能量軌域又稱為能階層(energy levels)，各個能階層所能容納的電子數目有限，電子在同一能階層內的能量差遠小於不同能階層間的能量差，這些能階層以 K、L、M、N 等表示，以 K 為最接近原子核的能階層，如圖 1-2 所示。



原子量子力學模型

軌道具有不連續（各自不同）的能階，此能階以量子數(quantum numbers) 定義：

1. 主量子數(principal quantum number ; n)：表示相對的軌域大小與能量，其為任何正整數 ($n=1, 2, 3$ 等)，如圖 1-2 中圍繞在原子核外的電子軌域。
2. 角動量子數(subsidiary quantum number ; l)：表示相對的軌域形狀， $l=0\sim n-1$ 。
3. 磁量子數(magnetic quantum number ; m_l)：其可以是從 $-l$ 由零至 $+l$ 的任何整數，共有 $(2l+1)$ 軌域，具有相同角動量子數的次層中，磁量子數僅表示相對的軌域方向不同。

4. 旋量子數(spin quantum number ; m_s)：

- a. 旋量子數是指電子自旋的方向，自旋可以逆時針或順時針，以 $m_s=+1/2$ 或 $m_s=-1/2$ 表示($m_s=\pm 1/2$)。
- b. 包立不相容原理(Pauli exclusion principle)：處於同一原子軌道的兩個電子必定擁有相反的自旋方向，如圖 1-3 所示。

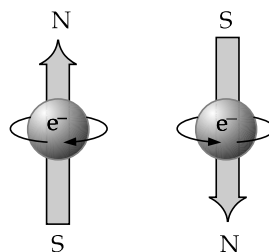


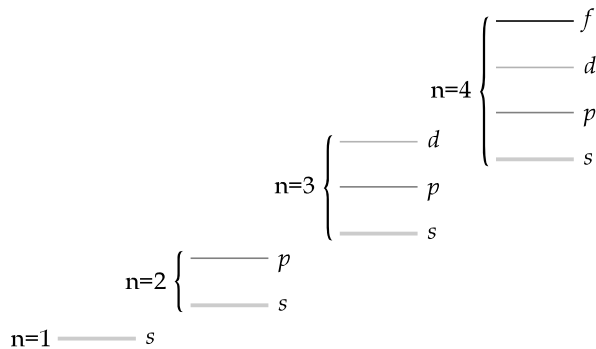
圖 1-3 電子自旋

對單電子原子而言，主層的大小就可決定軌域能量的高低；但對多電子原子而言，軌域的能量必須同時考慮主層和次層。每個軌域最多可容納 2 個電子（表 1-1），主層和次層的能階關係以圖 1-4 表示，高度愈高，能階也愈高。



表 1-1 主層、次層、軌域數及電子最大容量

主量子數 (n)	主層名稱	角動量 量子數 (l)	次層字母	軌域數	電子最大容量	
					每一次層	每一層
1	K	0	s	1	2	2
2	L	0	s	1	2	8
		1	p	3	6	
3	M	0	s	1	2	18
		1	p	3	6	
		2	d	5	10	
4	N	0	s	1	2	32
		1	p	3	6	
		2	d	5	10	
		3	f	7	14	

圖 1-4 $n=1$ 至 $n=4$ 主層和次層的能階關係圖

第一主層($n=1$)的 s 次層記做 $1s$ ；第二主層($n=2$)的 s 次層記做 $2s$ ，第二主層的 p 次層記做 $2p$ ，其餘依此類推。從圖 1-5 中可看出各軌域能量大小依序為：

$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 4d < 4f$$



判斷軌域能量的高低不能僅從主量子數 n 來判斷，必須主層和次層一起考慮才可以。因為不同的副層軌域所容納的電子數可不同，電子間的斥力造成不同的副層軌域，能量亦有所不同。圖 1-5 為軌域能階記憶圖。

☞ 電子組態

電子在主層和次層中的分布情形稱為電子組態(electron configuration)，通常以符號表示，例如第三主層($n=3$)的 d 次層含有 5 個電子，則以符號表示為 $3d^5$ 。電子會依圖 1-5 的順序先填滿低能階再至高能階的排列順序，而各次層在半滿或全滿時是最穩定的。如鉻(Cr)，其原子序為 24，若依上述排法， $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$ ，但此非最穩定狀態，其實際電子組態為 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$ （因為 s 次層可填 2 個電子， d 次層可填 10 個電子， $4s^1 3d^5$ 皆為半滿）。

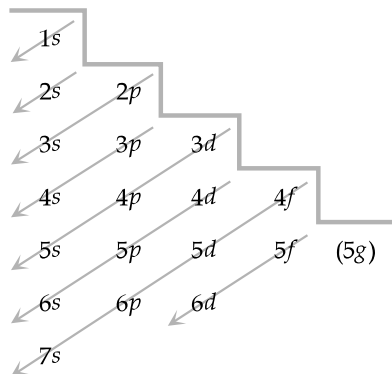


圖 1-5 軌域能階順序

五、週期表

週期表依原子序的順序排列，其規律和電子組態有絕對關係。如原子序為 2 的氦(He)，其 $1s$ 軌域被填滿，限制第一個週期只能有 2 個元素；原子序為 3 的鋰(Li)，一個電子填入 $2s$ 軌域；而原子序為 10 的氖(Ne)把 $2s$ 及 $2p$ 軌域都填滿，依序排列。在最右邊的惰性原素其外層組態為 $ns^2 np^6$ ，最左邊的 1A 族其外層組態為 ns^1 ，2A 族其外層組態為 ns^2 ，而 7A 族其外層組態為 $ns^2 np^5$ ，具有規律性。

六、電子陰電性

電子陰電性(electron negativity)又譯作離子性、負電性或電負度，此值愈大，代表吸引電子的能力愈大。同一週期從左至右，有效核電荷遞增、原子半徑遞減，對電子的吸引能力漸強，因而陰電性遞增；同族元素從上到下，隨著原子半徑的增大、元素陰電性遞減；而過渡元素的陰電性無明顯規律。



貳、原子間的鍵結力與能量

當兩原子分開長距離時，彼此間的作用力可忽略，而接近時，彼此間會產生作用力，包含吸引力(F_A)、排斥力(F_R)及兩者之和淨力(F_N)，三者是原子間分開距離的函數，如圖 1-6(a)圖所示。

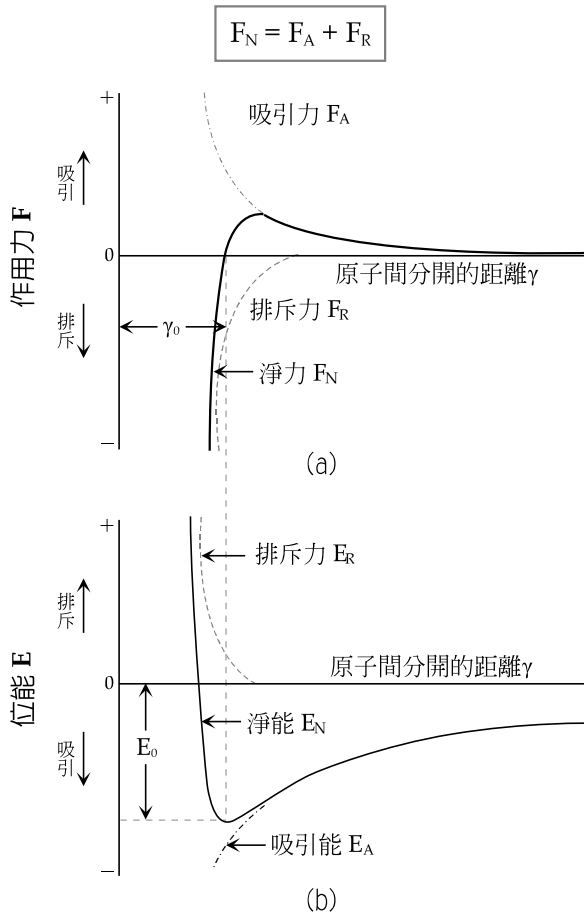


圖 1-6 兩原子間距與作用力及位能的關係

當 F_A 和 F_R 平衡或相等時便無淨力，存在一平衡狀態，此時兩原子的中心將保持在分開的平衡距離， $F_A + F_R = 0$ 。兩原子間的排斥能(E_R)、吸引能(E_A)及淨位能(E_N)，亦是原子間分開距離的函數，在平衡時，淨位能達最低。