

UNA NOVA PROPIETAT DELS PLÀSTICS: LA CONDUCTIVITAT

Xavier Duran

En el present treball, l'autor passa revista als diferents progressos realitzats en matèria de recerca, tant teòrica com fonamental, de plàstics conductors, els quals possibilitarien un avenç, a l'ensem tècnic i tecnològic, pel que fa a llurs aplicacions.

Els materials plàstics han substituït d'altres materials, sobretot a partir de la Segona Guerra Mundial. Així, compostos com polietilè, clorur de polivinil o niló han suplert, amb avantatge, d'altres materials clàssics. De tota manera, hi ha un camp en el qual els plàstics no han pogut aplicar-se, fins ara. L'ur propietat d'aïllants els impedia d'actuar com a conductors. Fa anys, però, que hom pensa en els grans avantatges que plàstics conductors podrien representar i se n'ha dut a terme una recerca basada en la possibilitat teòrica d'obtenir aquests compostos.

En l'estudi dels polímers conductors, la primera proposta teòrica fou la de Bill Little, de la Universitat d'Stanford, el 1964. Els americans treballaren amb poliacetilè, que esdevenia conductor si hom realitzava certes modificacions a la seva estructura. A la dècada dels anys seixanta i setanta s'intentà, principalment a la República Federal Alemanya, d'obtenir polímers poliradicalaris. Però no en reeixiren els intents, en no disposar de radicals prou estables. Ara, aquests estudis han pogut avançar gràcies als Radicals Lliures Inerts. Aquests compostos foren desenvolupats a l'Institut de Química Orgànica Aplicada de Barcelona, on el Doctor Manuel Ballester i el seu equip de col·laboradors els descobriren.

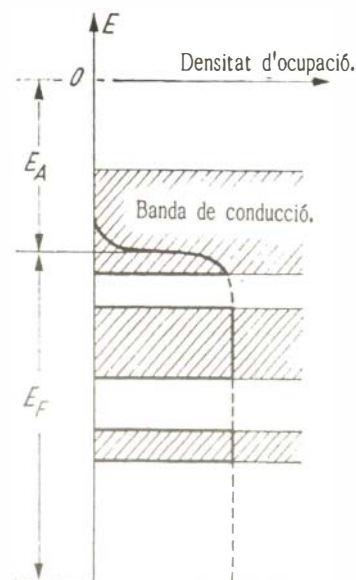
Aquests radicals tenen algunes propietats coincidents amb els metalls conductors, com ara l'existència d'electrons que ocupen parcialment orbitals moleculars relacionats estretament amb les anomenades bandes de conducció dels metalls. L'obtenció de radicals estables permet la manifestació d'aquesta propietat.

IONS I RADICALS

Per entendre la conductivitat d'aquests compostos, cal fer un repàs de l'estructura de les molècules orgàniques. Solen ser neutres elèctricament. Estan voltades d'un núvol d'electrons. El nombre d'electrons ve determinat pel d'enllaços. Així, si prenem el butà, que té quatre àtoms de carboni i deu d'hidrogen, n'existeixen tretze enllaços -entre dos carbonis o entre un carboni i un hidrogen-. Cada enllaç conté un parell d'electrons compartits. Per tant, n'hi ha vint-i-sis electrons. Si n'eliminem un, obtenim una molècula de càrrega positiva, és a dir, un cation. També podem eliminar un anion hidrur -ion de càrrega negativa-. Aquest està format per un àtom d'hidrogen -amb el seu corresponent electró- i un altre electró, que és el que dona la càrrega negativa.

El cation així obtingut és molt inestable. Tenen gran tendència a captar un anion, per recuperar la seva neutralitat elèctrica. També són inestables les molècules a les quals hem arrencat un àtom d'hidrogen -sense cap electró adicional-. Queda llavors un àtom de carboni unit només a uns altres tres àtoms. Aquestes molècules s'anomenen radicals lliures.

Per tal d'estabilitzar aquests radicals, hom ha hagut de treballar amb els compostos perclororgànics. Aquests compostos resulten de substituir tots els àtoms d'hidrogen d'una molècula orgànica -per exemple, els deu del butà- per àtoms de clor. En aquest cas, l'anomenarem perclorbutà. Aquesta substitució produeix una gran disminució de la reaccionabilitat i un augment de l'estabilitat tèrmica. L'equip de Manuel Ballester aconseguí, amb aquests compostos perclorats, d'obtenir polímers inatacables per agents químics i resistents a temperatures de 600°C.



Model de bandes d'energia en un cos sòlid. Hom pot apreciar les possibles densitats electròniques en aquestes.

LA QUÍMICA PERCLORORGÀNICA

Hom ha aconseguit d'obtenir, també, radicals lliures estables, és a dir, inerts. Aquests compostos, amb una existència de fraccions de segon, s'ahn pogut estabilitzar gràcies a la percloració. Els radicals lliures inerts poden tenir un o més electrons solitaris. Tot i ésser inerts, poden ser actius en certs processos de transferència electrònica. Es poden transformar en cations o anions, segons perdin o guanyin un electró.

Entre els radicals estabilitzats es troba el tetrafenil-p-tolil, conegut com PTBT. Podem dividir aquesta molècula en dues parts, cadascuna de les quals posseeix un electró solitari, amb la particularitat que una part no influeix en l'altra. Cadascun dels electrons solitaris es troba perfectament localitzat en una part de la molècula. D'aquí que algunes propietats en siguin iguals que les d'un compost conegut com PTM, que només té un electró solitari i que equivaldria a l'estructura de la meitat de la molècula de PTBT.

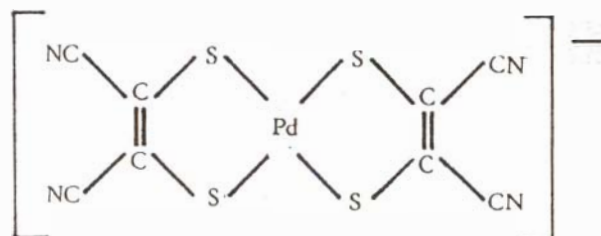
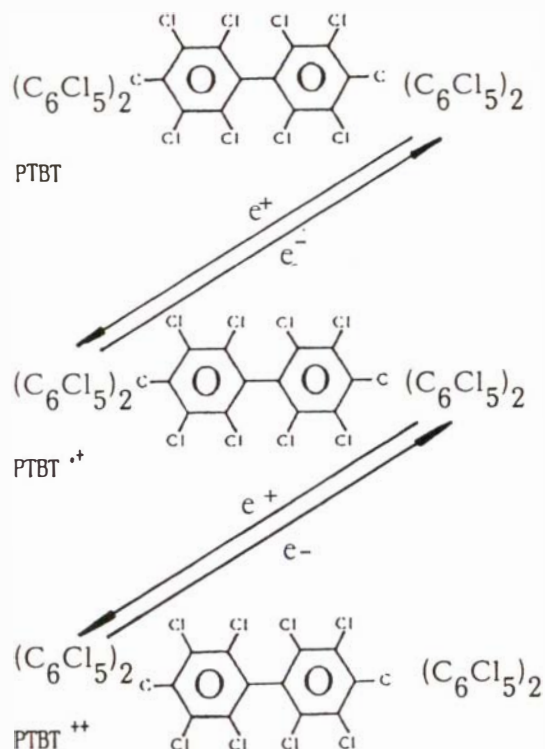
La molècula de PTBT ha estat transformada en un dication substituint els electrons solitaris per càrregues positives, obtenint, en comptes del PTBT, (els punts simbolitzen els electrons lliures) el PTBT⁺⁺. Aquesta transformació es produeix en dues fases. Primer s'obté el PTBT^{•+} i, després s'obté el dication PTBT⁺⁺. A més, s'estableix un equilibri entre aquestes molècules. Una molècula del radical PRBT, juntament amb una altra del dication dóna dues molècules del radical-cation PTBT^{•+}. I dues molècules d'aquest donen, respectivament, un radical i un cation.

El fet sorprenent s'esdevé quan hom estudia la molècula del radical-cation PTBT^{•+}. Les seves dues meitats són equivalents, és a dir, cadascuna sembla tenir mig electró i mitja càrrega positiva. Però com hem dit abans, les dues meitats del PTBT són elèctricament independents. Per tant, el que hi ha d'haver és dues espècies equivalents, que transformen l'una en l'altra amb gran rapidesa. Aquest equilibri ha estat anomenat intercanvi espín-càrrega. Ve a significar que l'electró solitari pot estar situat en una de les dues meitats, però no en una posició intermèdia. Per simbolitzar-ho, podem imaginar dues habitacions, separades per un envà. L'electró es podria trobar en una o altra habitació, però no pot existir la possibilitat de trobar-lo travessant l'envà.

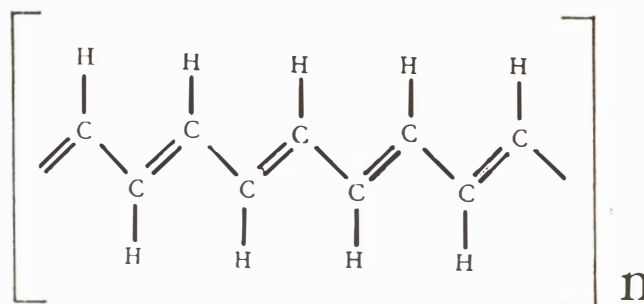
Els experiments amb aquests compostos poden motivar el desenvolupament dels anomenats metalls orgànics, que possibilitarien l'aplicació dels plàstics com a conductors.

D'ALTRES MOLÈCULES INVESTIGADES

Però no són els radicals lliures inerts els únics que permeten l'obtenció de plàstics conductors. Hi ha altres molècules estudiades per obtenir-ne. Una d'elles és el polipirrol. Aquest compost és un polímer del pirrol. El pirrol fou sintetitzat per primer cop el 1860 i està format per un anell heterocíclic amb un àtom de nitrogen i quatre de carboni, amb dos dobles enllaços. El polipirrol fou sintetitzat per primer cop el 1967, a la Universitat de Parma.



Molècula descoberta per Underhill i Friend.



Molècula de TRANS-POLIACETILÈ

Ara, a més d'observar les propietats conductores del polipirrol, hom ha estudiat un mètode d'obtenció més barat que el primitiu per via electrofísica, que precisava un electrode de platí. Ara és obtingut per via química, amb diversos reactius.

D'altra banda, existeixen els metalls sintètics formats per una combinació de dos tipus de compostos. Una molècula adquireix una càrrega positiva, desprenent-se dels seus electrons. Aquesta sol ser una molècula orgànica. L'altra molècula -orgànica o inorgànica- adquireix aquests electrons. Així obtenim una sèrie de ions alternats, positius i negatius. La conducció es produeix en primer lloc en els cations. Les òrbites de llurs electrons s'allarguen com una canal, coneguda com banda de valència. Els electrons s'hi poden traslladar a gran velocitat.

Aquests compostos són coneguts com a sals de transferència de càrrega. Les primeres foren obtingudes per la casa Du Pont a la dècada dels seixanta. La molècula acceptadora era el 7,7,8,8-tetraciano-p-quinodimetà, combinada amb el metall cesi. El compost anterior, conegut com TCNQ, fou combinat amb un donador orgànic, el tetratiafulvalè -TTF-. Això es realitzà a la dècada dels setanta en els Bell Laboratoires. Es descobrí que aquestes sals eren millors que les que tenien donadors metàl·lics. Les propietats recordaven les dels superconductors. Però quan el parell TTF-TCNQ es refredava, es transformava en aïllant.

El primer material orgànic superconductor es descobrí a Europa. A finals del 1979 s'obtingué un compost en el qual el donador era el tetrametiltetraselenofulvalè -TMTSF-, i l'acceptador, l'hexafluorur de fòsfor. El material esdevenia superconductor a -272°C i 12.000 atmosferes.

El 1983, un equip de la IBM descobrí un compost que es tornava superconductor a -271°C i 4.000 atmosferes. El donador era el bis (etileno-ditiol)tetrafulvalè, i l'acceptador, el ion perrenat. Actualment hom cerca que el donador sigui una estructura plana, orgànica, amb sofre o bé seleni.

MÉS CONDUCTOR QUE EL COURE

Però darrerament s'han descobert altres molècules orgàniques que condueixen com els metalls. Així, científics britànics han descobert la primera que condueix l'electricitat en dues direccions a temperatures properes al zero absolut. La majoria de metalls condueixen l'electricitat en una sola direcció, perquè les molècules del metall es col·loquen ordenadament. A 170 graus sota zero solen perdre la conductivitat, perquè el fred causa inestabilitat i distorsió a l'empaquetament cristal·lí, que trenca l'estructura electrònica unidimensional. Si hi ha interaccions electròniques addicionals, l'estructura electrònica del material s'estén en dues direccions i el cristall esdevé més resistent a la distorsió a baixes temperatures, retent la conductivitat.

L'equip de científics d'Allan Underhill, del Col·legi Universitari de Gal·les del Nord i Richard Friend, químic de Cambridge, han preparat un complex organometàl·lic de pal·ladi, que en estat

sòlid posseeix les molècules apilonades en dues direccions. A baixes temperatures, el material condueix només sota grans pressions -12.000 atmosferes-.

Underhill creu que a pressions normals les baixes temperatures causen petites orientacions moleculares que foren suficients per introduir esclatxes d'energia a l'estructura electrònica del material. Aquestes esclatxes destrueixen la conductivitat elèctrica. A altes pressions, les molècules es troben tan estretes que les interaccions entre elles augmenten. Això és suficient per assegurar que la conductivitat persisteixi.

Hom ha descobert també un polímer que condueix l'electricitat millor que el coure. Es tracta del poliactilè dopat, produït a la BASF. La clau de la conductivitat del polímer és el sistema d'electrons anomenat deslocalitzat. Si es dopa el polímer, com es fa amb semiconductors com el silici o l'arseniür de gal·li, n'augmenta la conductivitat. El procés és simple i barat: el poliactilè és dipositat en una solució saturada de iode en tetraclorur de carboni, durant una hora. El polímer s'oxida i té una conductivitat com dues vegades la del mateix pes de coure.

APLICACIONS

Els avantatges dels plàstics conductors són moltíssims. Així, la substitució del pesat coure per un polímer en conduccions elèctriques significaria un gran pas endavant. A més, els plàstics tenen unes possibilitats d'elaboració i disseny estructural o de propietats que no posseeixen els metalls. D'altra banda, les molècules es poden modificar fàcilment.

Els metalls orgànics serien solubles en certs dissolvents, cosa que no succeeix amb els metalls. Es podrien preparar tintes i pintures metàl·liques homogènies, per impressió de circuits electrònics o blindatge electromagnètic de sistemes electrònics.

En els vehicles espacials, en els quals és important la lleugeresa, els plàstics conductors esdevindrien transcendents. També es podrien col·locar en els imants dels motors elèctrics. Els circuits dels ordinadors podrien tenir un empaquetament més gran, ja que no es produïria gran augment de temperatura. Tampoc no hi hauria tantes pèrdues en la transmissió d'energia elèctrica.

Les possibilitats, doncs, són innumbrables. Per això continuen les investigacions per tal de poder aplicar, ben aviat, alguns dels compostos aquí exposats.

X. Duran